



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

VALÉRIO DE ARÁUJO GOMES

Modelagem e simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes na microescala atmosférica

Campina Grande – PB

2017

VALÉRIO DE ARAÚJO GOMES

Modelagem e simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes na microescala atmosférica

Teses apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande para obtenção do título de Doutor em Engenharia.

Área de concentração:
Modelagem e Simulação

Orientadores:
Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves
Prof. Dr. Antonio Tavernard Pereira Neto

Campina Grande - PB

2017

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

G633m Gomes, Valério de Araújo.
Modelagem e simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes na
microescala atmosférica / Valério de Araújo Gomes. – Campina Grande,
2017.
123 f. : il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de
Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2017.

"Orientação: Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves, Prof. Dr. Antonio
Tavernard Pereira Neto".

Referências.

1. Viscosidade Turbulenta. 2. Turbulência. 3. Modelo $k-\varepsilon$ padrão. 4.
Função Amortecimento. I. Alves, José Jailson Nicácio. II. Pereira Neto,
Antonio Tavernard. III. Título.

CDU 66.02(043)

Nome: GOMES, Valério de Araújo

Título: Modelagem e simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes na microescala atmosférica

Teses apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande para obtenção do título de Doutor em Engenharia.

Aprovado em: ____/____/____

Banca Examinadora

Prof. Dr. José Nilton Silva – Presidente da Sessão
Universidade Federal de Campina Grande – UFCG

Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira – Examinador externo
Universidade Estadual da Paraíba – UEPB

Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima – Examinador externo
Universidade Federal de Campina Grande – UFCG

Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior – Examinador Interno
Universidade Federal de Campina Grande – UFCG

Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves – Orientador
Universidade Federal de Campina Grande – UFCG

Prof. Dr. Antonio Tavernard Pereira Neto – Orientador
Universidade Federal de Campina Grande - UFCG

AGRADECIMENTOS

Aos professores Dr. José Jailson Nicácio Alves e Dr. Antonio Tavernard Pereira Neto pela orientação nesse longo caminho;

À Universidade Federal de Campina Grande – UFCG;

Aos professores da banca examinadora por todas as valiosas contribuições;

À minha esposa, Mazé, e meus filhos Caio Luca e Ian Gabriel;

À minha família, pais e irmãos, pelo incentivo e companheirismo ao longo da vida.

Heróis da Fé

*“A fé é a certeza de que vamos receber
as coisas que esperamos e a prova de
que existem coisas que não podemos ver.”*

(Hebreus 11:1)

RESUMO

GOMES, Valerio de A., **Modelagem e simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes na microescala atmosférica**, 2017. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2017.

O desenvolvimento de modelos matemáticos aplicados a simulação de dispersão de poluentes na atmosfera, utilizando fluidodinâmica computacional, tem sido cada vez mais intenso em função da evolução tecnológica das rotinas computacionais. Porém, o maior desafio ainda é o entendimento e a modelagem adequada dos fenômenos que caracterizam a dispersão quando ocorrem em regime turbulento. Para o fechamento dos termos que representam a turbulência, o modelo de duas equações $k-\varepsilon$ padrão é o que mais largamente tem sido utilizado. Contudo, este é um modelo desenvolvido a altos números de Reynolds e apresenta limitações quando o escoamento ocorre próximo das paredes do domínio. Desta forma, quando os efeitos de escoamentos a baixos números de Reynolds devem ser levados em consideração (quando a viscosidade molecular não pode ser desprezada), funções amortecedoras devem ser inseridas resultando em uma espécie de $k-\varepsilon$ para baixos números de Reynolds. Com isso, esta tese tem como objetivo apresentar o desenvolvimento de um modelo de dispersão atmosférica matemático, tendo como contribuição científica o desenvolvimento de equações empíricas para definição da função amortecimento (f_{μ}) no cálculo da viscosidade turbulenta, em complemento as funções “paredes” utilizadas comumente pelos códigos computacionais comerciais, corrigindo desta forma o modelo $k-\varepsilon$ padrão. Como ferramenta computacional, foi utilizado o software CFX[®] para as simulações fluidodinâmicas. Para validação do modelo, foram utilizados os dados do experimento de Copenhagen. Os índices estatísticos do modelo também foram comparados com os resultados de outras pesquisas encontradas na literatura. Os resultados mostraram que a metodologia proposta foi capaz de simular o experimento de campo com um nível bastante satisfatório, atingindo um erro quadrático médio normalizado (NMSE) de 0,02 e um fator de correlação (Cor) de 0,95.

Palavras-Chaves: viscosidade turbulenta, turbulência, modelo $k-\varepsilon$ padrão, função amortecimento

ABSTRACT

GOMES, Valerio de A. **Modeling and fluid dynamics simulation of pollutant dispersion in the atmospheric microscale.** 2017. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2017.

The development of mathematical models, which simulate the dispersion of pollutants in the atmosphere using computational fluid dynamics, has been increasingly intense due to the technological evolution of computational routines. For the closure of the terms representing the turbulence, the model of standard two equations $k-\varepsilon$ is the most widely used. However, when the effects of low Reynolds numbers should be considered (when molecular viscosity cannot be neglected), damping functions should be inserted resulting in a kind of $k-\varepsilon$ for low Reynolds numbers. This thesis aims to present the development of a mathematical atmospheric dispersion model, whose scientific contribution is the development of empirical equations to define the damping function (f_μ) in the calculation of turbulent viscosity, in addition the functions "walls" commonly used by commercial computer codes. As a computational tool, CFX® software has been used to perform fluid dynamics simulation. For the validation of the model, the data from the Copenhagen experiment were used. The statistical indices of the model were also compared with the results of other studies found in the literature. The results showed that the proposed methodology was able to simulate the field experiment with a very satisfactory level, reaching a normalized mean square error (NMSE) of 0.02 and a correlation factor (Color) of 0.95.

Key Words: eddy viscosity, turbulence, $k-\varepsilon$ standard model, damping function

LISTA DE SIGLAS, SIMBOLOS E ABREVIATURAS

| | |
|--------------------------------------|--|
| AERMOD | Modelo estacionário de pluma gaussiana |
| AERMET | Pré-processamento dos dados meteorológicos do AERMOD |
| AERMAP | Pré-processamento dos dados de terreno e de localização das fontes do AERMOD |
| AMS | <i>American Meteorological Society</i> |
| AL | Atmosfera Livre |
| $C(x,y,z)$ | Concentração do Poluente nas coordenadas (x,y,z) |
| CALMET | <i>Califórnia Meteorological Model</i> |
| CEN | Camada Estável Noturna |
| CFD | <i>Computational Fluid Dynamics</i> |
| CLA | Camada Limite Atmosférica |
| CLC | Camada Limite Convectiva |
| CLN | Camada Limite Noturna |
| CLP | Camada Limite Planetária |
| CONAMA | Conselho Nacional de Meio Ambiente |
| Corr | Coefficiente de correlação |
| C_μ | Constante de proporcionalidade do modelo $k-\varepsilon$ |
| $C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}$ | Constantes empíricas do modelo $k-\varepsilon$ |
| CR | Camada Residual |
| D | Coefficiente de difusão molecular, (m^2/s) |
| ECT | Energia Cinética Turbulenta |
| f | Parâmetro de Coriolis, (s^{-1}) |
| f_μ | Função de Amortecimento |
| $Fa2$ | Fator de dois |
| Fb | Fator de Inclinação |
| Fs | Desvio fracional padrão |
| g | Aceleração gravitacional, (m^2/s) |
| H | Fluxo de calor na superfície, (J/m^2) |
| h | Altura da CLP, (m) |
| HF ₆ | Hexafluoreto de enxofre |
| k | Constante de van Kármán |

| | |
|-----------|--|
| K | Difusividade turbulenta |
| L | Comprimento de Monin-Obukhov,(m) |
| LES | <i>Large Eddy Simulation</i> |
| NMSE | Erro quadrático médio normalizado |
| n | Expoente genérico, adimensional |
| PDF | Função densidade de probabilidade |
| P_k | Taxa de produção de energia cinética turbulenta |
| Q | Vazão mássica de emissão, (g/s) |
| RANS | <i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i> |
| RMS | <i>Root Mean Square</i> |
| Ri_f | Número de Richardson para fluxo, adimensional |
| S | Termo fonte ou sumidouro |
| Sc | Número de Schmidt, adimensional |
| SBL | <i>Stable boundary limit</i> |
| T | Temperatura absoluta, (K) |
| t | Tempo, (s) |
| T_{ref} | Temperatura de referência, (K) |
| u | Velocidade média do vento, (m/s) |
| u, v, w | Componentes cartesianas do vetor velocidade, (m/s) |
| u_{ref} | Velocidade de referência, (m/s) |
| u^* | Velocidade de fricção, (m/s) |
| u^+ | Velocidade próxima à parede, (m/s) |
| USEPA | Agência de Proteção Ambiental Norte Americana |
| y | Coordenada de altura do domínio, (m) |
| y^+ | Distância adimensional da parede |
| y_0 | Altura da rugosidade, (m) |
| y_R | Rugosidade de grão de areia, (m) |
| x | Coordenada de largura do domínio, (m) |
| z | Coordenada de comprimento domínio, (m) |

LISTAS DE SÍMBOLOS GREGOS

| | |
|-------------------------|--|
| ε | Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, (m^2/s^3) |
| θ | Temperatura potencial, (K) |
| μ | Viscosidade molecular, (Pa/s) |
| μ_t | Viscosidade turbulenta, (Pa/s) |
| μ_{ef} | Viscosidade efetiva, (Pa/s) |
| ρ | Massa específica do ar, (kg/m^3) |
| σ_y e σ_z | Coefficientes de dispersão lateral e vertical, (m) |
| τ_0 | Tensão de cisalhamento em relação ao ar atmosférico, (N/m^2) |
| \emptyset | Propriedade genérica |
| Ψ_m | Parâmetro de classe de estabilidade |

SUBESCRITO

| | |
|-----------|----------------------------|
| i, j, k | Notação indicial |
| up | Nó antecessor |
| t | Propriedade de turbulência |

SOBRESCRITO

| | |
|---------------|--------------------------|
| \prime | Flutuações turbulentas |
| $-$ | Valores médios temporais |
| \rightarrow | Vetor |

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 1.1 - Sistema de referência euleriano. Adaptado de (Zannetti, 1990) | 5 |
| Figura 1.2 - Sistema de referência lagrangeano. Adaptado de (Zannetti, 1990) | 5 |
| Figura 1.3 - Modelo de pluma gaussiana (Hoinaski, 2015) | 11 |
| Figura 2.1 – Circulação geral dos ventos na atmosfera (Lorerdo-Soura, 2004) | 22 |
| Figura 2.2 – Representação de uma inversão térmica (Lisboa, 2005) | 23 |
| Figura 2.3 - Estrutura da camada limite atmosférica (CLA) ao longo do dia. (Boçon, 1998) | 25 |
| Figura 2.4 - Esquema dos perfis de velocidades médias e tensões de Reynolds da CLA e alturas características (Lorerdo-Soura, 2004) | 27 |
| Figura 3.1 – Subdivisão da região próxima à parede (CFX [®] , 2013) | 44 |
| Figura 3.2 – Desenvolvimento espacial do comprimento de Prandtl. (Rosa, 2003) | 50 |
| Figura 4.1 – Esquema de um volume de controle (tetraédrico). Adaptado (CFX [®] , 2013) | 54 |
| Figura 4.2 – Volume de controle e pontos de integração (ipn). Adaptado (CFX [®] , 2013) | 54 |
| Figura 4.3 – Representação esquemática de um elemento hexaédrico. Adaptado (CFX [®] , 2013) | 56 |
| Figura 4.4 – Estratégia de solução do sistema de equações discretizadas. Adaptado (CFX [®] , 2013) | 59 |
| Figura 5.1 – Área utilizada no experimento. O eixo x é a direção Leste, enquanto o eixo y a direção Norte da região. Os pontos de coleta foram distribuídos formando três arcos. O gás traçador foi lançado da posição $(x,y) = (0,0)$ (Gryning, 1998). | 61 |
| Figura 5.2 – Representação do domínio de solução (vista em perspectiva e vista superior respectivamente), bem como a localização da fonte de lançamento (bola vermelha). | 64 |
| Figura 5.3 – Vista lateral do domínio composto com a malha não estruturada proposta. Malha aplicada a todas as simulações do experimento de Copenhagen. | 69 |

| | |
|--|----|
| Figura 6.1 - Direção da pluma na simulação do experimento 19/07/1979 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 73 |
| Figura 6.2 - Direção da pluma na simulação do experimento 20/09/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 74 |
| Figura 6.3 - Direção da pluma na simulação do experimento 26/09/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 74 |
| Figura 6.4 - Direção da pluma na simulação do experimento 19/10/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 75 |
| Figura 6.5 - Direção da pluma na simulação do experimento 03/11/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 75 |
| Figura 6.6 - Direção da pluma na simulação do experimento 09/11/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 76 |
| Figura 6.7 - Direção da pluma na simulação do experimento 30/04/1979 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 76 |
| Figura 6.8 - Direção da pluma na simulação do experimento 27/06/1979 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 77 |
| Figura 6.9 - Direção da pluma na simulação do experimento 06/07/1979 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 77 |
| Figura 6.10 - Direção da pluma na simulação do experimento 19/07/1979 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento. | 78 |
| Figura 6.11 - Representação da dispersão atmosférica do experimento 26/09/77 sem a variação da viscosidade turbulenta (à esquerda), e a dispersão com a utilização de equação empírica correlacionando a viscosidade turbulenta com a distância (à direita). | 83 |
| Figura 6.12 - Representação da dispersão atmosférica do experimento 19/07/77 sem a variação da viscosidade turbulenta (à esquerda), e a dispersão com a utilização de equação empírica correlacionando a viscosidade turbulenta com a distância (à direita). | 84 |
| Figura 6.13 - Variação da viscosidade turbulenta com a altura (z) para o experimento 26/09/1978 sem a aplicação da função amortecimento. | 86 |
| Figura 6.14 - Variação da energia cinética turbulenta (k) com a altura (z) no experimento 26/09/1978 sem a aplicação da função amortecimento. | 87 |
| Figura 6.15 - Variação da dissipação da energia cinética turbulenta (ε) com a altura (z) no experimento 26/09/1978 sem a aplicação da função amortecimento. | 87 |

| | |
|--|----|
| Figura 6.16 - Representação das camadas de escoamento distribuídas em função da viscosidade dominante. | 88 |
| Figura 6.17 – Representação da variação da viscosidade turbulenta em função da distância (z) com base na função amortecimento proposta. | 88 |
| Figura 6.18 - Representação da troca de movimento entre camadas do escoamento. | 89 |
| Figura 6.19 - Variação do perfil do vento em planos (x,z) variando de 2 metros de altura até 1900 metros sem aplicação da função amortecimento. μ_t constante com a distância (coordenada z). | 89 |
| Figura 6.20 - Variação do perfil do vento em planos (x,z) variando de 2 metros de altura até 1900 metros quando aplicada a função amortecimento. μ_t variando com a distância (coordenada z) | 90 |
| Figura 6.21 - Sobreposição da imagem da pluma com o perfil do vento para o experimento 26/09/1978 sem aplicação da função amortecimento. | 91 |
| Figura 6.22 - Sobreposição da imagem da pluma com o perfil do vento para o experimento 26/09/1978 com aplicação da função amortecimento. | 91 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|----|
| Tabela 2.1 - Classe de estabilidade de Pasquill | 21 |
| Tabela 2.2 - Condições meteorológicas que definem a estabilidade de Pasquill | 21 |
| Tabela 3.1 - Fundamentos da fluidodinâmica | 32 |
| Tabela 3.2 - Constantes do Modelo $k - \epsilon$ Padrão | 43 |
| Tabela 5.1 - Dados principais do experimento de Copenhagen | 62 |
| Tabela 5.2 - Dados meteorológicos do experimento de Copenhagen | 62 |
| Tabela 5.3 - Grau de convecção do experimento de Copenhagen | 63 |
| Tabela 5.4 - Funções amortecimento para viscosidade turbulenta propostas | 68 |
| Tabela 5.5 - Resumo das características da malha (referência: experimento 20/09/78) | 69 |
| Tabela 6.1 - Valores da velocidade a montante e na entrada lateral do domínio, definida pela decomposição do vetor velocidade do vento na entrada do domínio. | 73 |
| Tabela 6.2 - Resultados do teste de malha | 79 |
| Tabela 6.3 - Resultados do teste de passo de tempo | 80 |
| Tabela 6.4 - Comparação do valor da velocidade medida em campo com a velocidade calculada em diferentes alturas. | 81 |
| Tabela 6.5 Comparação do valor da velocidade de fricção (u_*) do modelo com os dados do Experimento de Copenhagen | 81 |
| Tabela 6.6 - Resultados Comparativos de Simulações com a Aplicação da Função Amortecimento – experimento 26/09/1977 | 84 |
| Tabela 6.7 - Resultados Comparativos de Simulações com a Aplicação da Função Amortecimento – experimento 19/07/1978 | 85 |
| Tabela 6.8 - Comparação entre os Valores de Concentrações Integrada do Modelo com o Experimento de Copenhagen | 92 |
| Tabela 6.9 - Quadro Comparativo Entre o Modelo Proposto e Outros Autores | 94 |

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

| | |
|--|----|
| 1.1 Motivação | 2 |
| 1.2 Revisão Bibliográfica | 3 |
| 1.2.1 Modelos Eulerianos | 6 |
| 1.2.2 Modelos Lagrangeanos | 8 |
| 1.2.3 Modelos Gaussianos | 10 |
| 1.2.4 Modelos de Turbulência a Duas Equações | 13 |
| 1.3 Objetivos da Tese | 17 |

CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

| | |
|---|----|
| 2.1 A Estabilidade Atmosférica | 19 |
| 2.2 Influência dos Ventos | 21 |
| 2.3 Influência da Inversão Térmica | 23 |
| 2.4 Influência da Topografia | 24 |
| 2.5 A Camada Limite Atmosférica – CLA | 24 |
| 2.5.1 Perfil de Velocidade e Temperatura na CLP | 28 |

CAPÍTULO 3 – MODELAGEM MATEMÁTICA

| | |
|---|----|
| 3.1 Considerações Iniciais | 30 |
| 3.2 Equações de Conservação | 31 |
| 3.2.1 Conservação da Massa | 32 |
| 3.2.2 Transporte da Quantidade de Movimento | 33 |
| 3.2.3 Conservação da Energia | 35 |
| 3.2.4 Equação do Transporte de Poluentes | 37 |
| 3.3 Tratamento da Turbulência | 37 |
| 3.3.1 Modelo de Turbulência $k - \epsilon$ | 39 |
| 3.3.2 Escoamento próximo a parede | 42 |
| 3.3.2.1 O Tratamento de Velocidade Próximo a Parede | 44 |
| 3.3.2.2 O Tratamento de Viscosidade Turbulenta Próximo a Parede | 46 |

CAPÍTULO 4 – MÉTODO NUMÉRICO

| | |
|--|----|
| 4.1 Discretização das Equações Governantes | 52 |
| 4.2 O Acoplamento Pressão – Velocidade | 54 |
| 4.3 Funções da Forma | 55 |
| 4.4 Discretização dos Termos de Advecção e Transientes | 56 |
| 4.5 Estratégia de Solução – O solver Acoplado | 58 |
| 4.6 Critério de Convergência | 59 |

CAPÍTULO 5 – AVALIAÇÃO DE PERFORMANCE DO MODELO

| | |
|---|----|
| 5.1 O Experimento de Copenhagen | 60 |
| 5.1.1 Domínio de Solução | 63 |
| 5.1.2 Representação da Fonte de Emissão | 64 |
| 5.1.3 Condições de Contorno | 64 |
| 5.1.3.1 Fronteira a Montante | 64 |
| 5.1.3.2 Fronteiras Laterais | 66 |
| 5.1.3.3 Fronteira Inferior | 67 |
| 5.1.3.4 Fronteira a Jusante | 67 |
| 5.1.3.5 Condições Iniciais | 68 |
| 5.1.3.6 Malha Computacional | 68 |
| 5.1.3.7 Parâmetros Transientes | 70 |
| 5.1.3.8 Índices Estatísticos | 70 |

CAPÍTULO 6 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

| | |
|---|----|
| 6.1 Definição da Direção do Vetor Velocidade do Vento na Entrada de Domínio | 72 |
| 6.2 Teste da Malha | 78 |
| 6.3 Teste de Passo de Tempo | 79 |
| 6.4 Teste de Aderência do Cálculo do Perfil Vertical de Vento e Velocidade de Fricção | 80 |
| 6.5 Avaliação da Influência da Função Amortecimento | 82 |
| 6.6 Comparação com Outros Modelos Dispostos na Literatura | 92 |

CAPÍTULO 7 – CONCLUSÕES

| | |
|---|----|
| 7.1 - Perspectivas para Futuros Trabalhos | 97 |
|---|----|

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

98

1. INTRODUÇÃO

A qualidade do ar tem se tornado uma preocupação mais intensa nas últimas décadas em todo o mundo, e com isso tem exigido maior conhecimento das medidas mitigadoras associadas ao controle de processo, equipamentos de controle de poluição e seus mecanismos de transporte envolvidos.

A importância do estudo das dispersões atmosféricas tornou-se mais evidente com o aumento das emissões de poluentes causadas pelo crescimento das áreas urbanas, incluindo o aumento da frota de veículos e o crescimento industrial. Outro fator, que tem levado ao estudo sistemático do comportamento da dispersão de poluentes na atmosfera, é a localização física dos grandes centros urbanos e industriais. Em geral estes centros estão localizados em regiões bastante heterogêneas em termos de relevo, tipos de solo e ocupação. Dependendo do grau de variação dessas variáveis a dispersão das emissões torna-se mais difícil de ser caracterizada. Com isso, o entendimento prévio do impacto dessas variáveis na dispersão dos poluentes é primordial para definição até mesmo da viabilidade de instalação de empreendimentos numa determinada região, especialmente naquelas localizadas nos países em desenvolvimento.

Apesar do registro histórico de vários casos de lançamento de poluentes no ar, com níveis preocupantes à saúde pública, como o caso da cidade de Cubatão-SP na década de 80, e de movimentos em prol da exigência de leis específicas que protegessem a qualidade do ar, no Brasil somente com a Constituição Federal de 1988 é que esse assunto ficou mais evidente. Posteriormente com a definição da Resolução do CONAMA, número 3, de 1990 é que o Brasil definiu limites para qualidade do ar no território nacional.

A Constituição Federal Brasileira de 1988 conferiu proteção ao meio ambiente de forma bem abrangente, inclusive no que diz respeito à necessidade do estudo prévio de impacto ambiental e à indenização dos danos causados ao meio ambiente. A Lei de Política Nacional do Meio Ambiente (Lei 6.938/81) adotou a teoria do “risco da atividade”, criando o regime da responsabilidade civil objetiva pelos danos ambientais causados. Isso significa que o agente poluente, independentemente de sua conduta ser intencional ou não, tem o dever de indenizar.

A poluição atmosférica tem ganhado grande projeção graças ao trabalho da Organização Mundial da Saúde (OMS). Em 2014, a OMS estimou que apenas 12% da

população mundial vive em cidades com qualidade do ar em conformidade aos padrões estabelecidos comprovadamente pelo monitoramento e por relatórios frequentes. Em abril de 2014, a OMS publicou relatório estimando que em 2012 ocorreram 3,7 milhões de mortes de pessoas com menos de 60 anos de idade causadas pela poluição atmosférica (OMS, 2014).

O trabalho proativo de fazer as devidas avaliações de impacto ambiental, e isso logicamente inclui as avaliações de qualidade do ar, é fundamental para o estabelecimento da sustentabilidade no âmbito dos novos empreendimentos e dos já existentes também.

1.1. Motivação

O monitoramento e gerenciamento da qualidade do ar são quesitos de suma importância na gestão ambiental de qualquer empresa que tenha fontes de emissões atmosféricas instaladas nas suas dependências. A simulação de dispersão das emissões atmosféricas, e conseqüentemente a predição da qualidade do ar de forma analítica, é uma prática mais comum de ser realizada quando o empreendimento precisa demonstrar qual será o impacto de novos projetos ou grandes expansões para os órgãos ambientais competentes. Com isso, a existência de um modelo matemático simples, assertivo e de acesso ilimitado é de fundamental importância para que possam ser avaliadas, com combinações inesgotáveis, todas as variáveis que impactam na dispersão das emissões dos poluentes em análise. Desta forma, de posse deste tipo de ferramenta, pode-se ter uma avaliação abrangente e mais completa sobre o grau de impacto das variáveis em questão, contribuindo de forma mais contundente nas análises críticas de mudança de processo ou condições atmosféricas.

Assim sendo, a modelagem e simulação da dispersão atmosférica podem ser largamente utilizada na prática para:

- 1) Avaliação do impacto ambiental das emissões de novos projetos, bem como o atendimento aos padrões legais de qualidade do ar;
- 2) Avaliação do design de novos projetos para definição da localização e altura de chaminés;
- 3) Avaliação da correta localização das estações de monitoramento da qualidade do ar, sob o impacto da dispersão da pluma de contaminantes;
- 4) Avaliação do impacto dos sistemas de tratamento e controle de emissões nas chaminés.

Apesar de existirem vários modelos validados e aceitos pelos órgãos regulamentadores competentes, é sabido que algumas simplificações e considerações podem invalidar os estudos em questão. Por exemplo, no caso de regiões com topografias complexas (colinas, montanhas ou vales) esses modelos matemáticos simples já não produzem resultados satisfatórios. Neste caso, estudos utilizando túnel de vento (desenvolvidos em laboratório) e modelos físicos em escala reduzida são mais aplicáveis para fins de regulamentação ambiental.

Todavia, o avanço no desenvolvimento computacional de rotinas e softwares modernos, sobretudo no que diz respeito a técnicas de fluido dinâmica computacional (CFD), tem contribuído para a implementação de modelos de dispersão atmosférica considerando variáveis complexas como: topografias irregulares, estabilidade atmosférica, fenômenos químicos, fatores de turbulência e etc. Assim, a modelagem matemática da dispersão atmosférica tem avançado cada vez mais em relação aos experimentos em laboratório e em escalas reduzidas, considerando não só o custo reduzido comparativamente, mas também a possibilidade de simulações de fenômenos que não são conseguidos nos experimentos de escalas reduzidas e túneis de vento.

Com isso, a motivação para este trabalho está fundamentada na necessidade do desenvolvimento de técnicas de modelagem robustas, que possam contribuir para o aperfeiçoamento de modelos matemáticos de previsão da qualidade do ar, considerando simulações de experimentos de campo e variáveis complexas de turbulência.

1.2. Revisão Bibliográfica

Os esforços para entender os fenômenos de dispersão de poluentes na atmosfera terrestres, iniciaram antes mesmo do avanço tecnológico de computadores com sub-rotinas capazes de resolver em minutos o que antes era impossível de se calcular. Desta forma, os registros dos primeiros estudos da dispersão de substâncias na atmosfera datam das primeiras décadas do século passado, como os trabalhos de Richardson (1922), Richardson (1926), Taylor (1921), Taylor (1960), Rossby (1932), Bosanquet e Pearson, (1936), Hewson, (1945) e Baron et al. (1949). Desta lista, o inglês Lewis Fry Richardson, (1922) efetuou a primeira tentativa de simular a dinâmica atmosférica de forma numérica. Sua técnica consistia em resolver equações diferenciais através do método de diferenças finitas. Em 1932 Sutton (1932) publicou um trabalho apresentando uma teoria para a difusão turbulenta na atmosfera. Também Sutton (1947a), Sutton

(1947b) e Sutton (1950) estudou o problema da difusão na baixa atmosfera a partir de fontes contínuas pontuais (chaminés) e de linha, considerando também gases quentes, em que era assumida uma distribuição gaussiana da concentração a partir da linha de centro da pluma.

Em 1963, Brock e Hewson (1963) realizaram o primeiro trabalho numérico constatado na literatura. Utilizando um computador analógico, os autores calcularam a dispersão turbulenta entre a camada de inversão e o solo, com difusividades turbulentas constantes ou função da distância percorrida pela pluma. Outro resultado importante foi publicado por Frenkiel (1952) que apresentou a equação para as concentrações $c = c(x,y,z,t)$ para uma fonte pontual instantânea ("puff"), assumindo distribuição gaussiana nas direções transversais à do vento. Lantz (1972) simulou numericamente a dispersão de poluentes de múltiplas fontes para determinar a melhor localização de plantas industriais. No mesmo período, Lee (1972) realizou trabalhos semelhantes, focados em terrenos não-planos, utilizando de forma pioneira, o método de elementos finitos.

Logos com os primeiros estudos publicados sobre as diferentes metodologias de abordar a questão da dispersão atmosférica, foram definidas duas classes de abordagens sobre a modelagem matemática do fenômeno:

- 1) Abordagem euleriana: a dispersão é estudada em termos de uma equação diferencial parcial para a conservação da massa da substância considerada, sendo resolvida em uma malha (grade) fixa no tempo e no espaço (Figura 1.1).

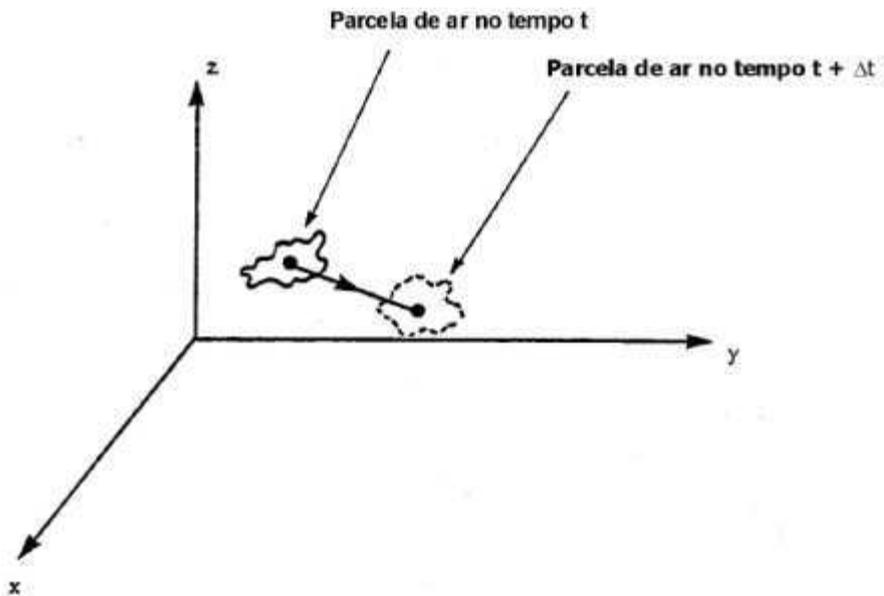


Figura 1.1 – Sistema de referência euleriano. Adaptado de Zannetti (1990)

- 2) Abordagem lagrangeana: utilizam um sistema de referência que segue o movimento da atmosfera (Figura 1.2). O sistema de coordenadas é baseado na posição de uma partícula em um tempo t , relativo à sua posição (a,b,c) em um tempo de referência t_0 .

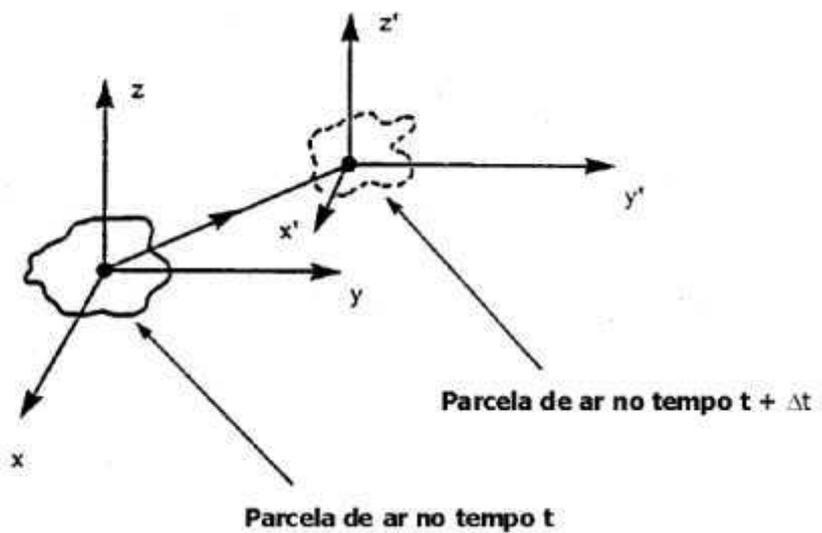


Figura 1.2 – Sistema de referência lagrangeano. Adaptado de Zannetti (1990)

1.2.1. Modelos Eulerianos

Na modelagem euleriana, a dispersão é estudada em termos de uma equação diferencial parcial para a conservação da massa da substância considerada, sendo resolvida em uma malha (grade) fixa no tempo e no espaço. Elas fornecem valores médios de concentração, para os poluentes considerados, em um ponto no espaço. A partir das equações de conservação é possível obter um modelo matemático da dispersão de uma fonte, dadas as apropriadas condições iniciais e de contorno, e dos coeficientes de difusão (Stull, 1998).

Os modelos eulerianos se baseiam na resolução da equação da conservação da massa da espécie química de poluentes expressa em termos de concentração (Mello, 2010):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = - \frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S \quad (1.1)$$

onde C é a concentração média, U , V e W são as velocidades médias componentes do vento nas direções x , y e z e S é o termo fonte. Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam os fluxos turbulentos de poluentes na direção longitudinal, lateral e vertical, respectivamente.

O modelo mais utilizado para fechar o problema da equação (1.1) é o emprego da teoria K , a qual assume que o fluxo turbulento é proporcional à magnitude do gradiente da concentração média, ou seja:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + S \quad (1.2)$$

onde C é a concentração do poluente, K_x , K_y , K_z são os coeficientes de difusão turbulentos nas direções de x , y e z (segundo a analogia de difusão molecular), respectivamente, U e V são as velocidades médias componentes do vento nas direções de x e z e S é termo fonte/sumidouro.

Para a solução da equação (1.2) são empregados métodos numéricos do tipo volumes finitos, diferenças finitas, elementos finitos (Maliska, 1995). Os valores de

concentração são obtidos para cada um dos volumes (pontos) de uma malha (grade). O principal desafio destes modelos é a determinação dos coeficientes de difusão turbulenta K_i , onde $i = x, y, z$. Estas difusividades são dependentes da posição e do tempo, e invés dos coeficientes de difusão molecular, não são funções do fluido, mas sim do estado do escoamento, que por sua vez é determinado pelo grau de estabilidade da atmosfera. Diversas aproximações são utilizadas para estimar tais difusividades (Teoria das similaridades de Monin-Obukhov, Teoria estatística de Taylor da turbulência, etc.) (Moraes, 2001).

Em Degrazia e Moraes (1989), publicaram no seu trabalho a simulação numérica do fenômeno de transporte turbulento de poluentes abandonados de fontes pontuais contínuas, em camadas limites convectiva e estável. Na simulação foram usados coeficientes de difusão que continham não apenas os efeitos de memória, presentes em fluxos turbulentos, como também os parâmetros de escalas universais, que descrevem a estratificação da atmosfera. O modelo levava em conta a dependência das principais escalas do movimento com a altura e reproduzia satisfatoriamente vários aspectos observados da difusão turbulenta. No trabalho de Degrazia e Moraes (1989), foi utilizada a teoria K , na qual os fluxos turbulentos de matéria são parametrizados como proporcionais aos gradientes da concentração, em combinação com a teoria da difusão estatística de Taylor (Taylor, 1921). Na camada limite estável, a simulação numérica da concentração de poluentes reproduziu satisfatoriamente a limitada mistura vertical observada.

Outros estudos foram desenvolvidos a fim de determinar estas difusividades através da metodologia de problemas inversos, como por exemplo: Moraes et al. (2001) e Campos et al. (2000). Outros trabalhos também consultados utilizaram a abordagem euleriana, como Dawson et al. (1991) que simularam a dispersão de um poluente utilizando um código de laboratório denominado TEMPEST/PES.

O estudo de Boçon (1998), propôs um modelo matemático tridimensional baseado nas equações da mecânica dos fluidos, que juntamente com uma variante não isotrópica do modelo de turbulência $k-\varepsilon$ são utilizados para o cálculo do escoamento e da dispersão de substâncias na microescala atmosférica (distâncias da ordem de alguns km). O modelo utilizado segue a abordagem euleriana. Neste caso foi utilizado o modelo denominado SMOKE acoplado de um modelo hidrodinâmico chamado NAVIER. O modelo foi implementado em um código computacional tridimensional utilizando o método numérico dos volumes finitos em coordenadas curvilíneas generalizadas. O modelo

permitiu incorporar, através de condições de contorno e termos fontes nas equações governantes, fenômenos relevantes ao problema como a estabilidade atmosférica (estratificação térmica), a altura da camada de mistura e a rugosidade do terreno. O modelo proposto por Boçon (1998) também permite a incorporação de processos físicos de remoção, como a deposição seca e a úmida (lavagem por chuvas), a remoção química de poluentes primários e formação de poluentes secundários. O modelo foi aplicado a diversos casos de escoamento e dispersão em túnel de vento, sob condições de estratificação neutra e estável, sobre três topografias tridimensionais idealizadas. Comparações com resultados experimentais demonstraram que o modelo anisotrópico de turbulência tem melhor habilidade de prever a dispersão da pluma do que o $k-\varepsilon$ clássico, especialmente no caso de escoamento estavelmente estratificado, em que o caráter não isotrópico da turbulência é relevante.

1.2.2. Modelos Lagrangeanos

No esquema lagrangeano formula-se um modelo de trajetórias para o movimento das partículas de fluido. O elemento ou partícula de um fluido é um pequeno volume de controle que viaja na velocidade local do meio fluido. A sua dimensão é grande quando comparada com as escalas moleculares e pequena em relação a menor escala de movimento, a microescala de Kolmogorov. As partículas movem-se seguindo os vórtices turbulentos, descrevendo trajetórias aleatórias (Carvalho, 1999). A equação lagrangeana fundamental para a dispersão atmosférica de uma única espécie de poluente é dada por (Stull, 1998):

$$C(x,t) = \int_0^t \int P(x,t/x',t') S(x',t') dx' dt' \quad (1.3)$$

onde $C(x,t)$ é a concentração média em x no tempo t , $S(x',t')$ é o termo fonte, $P(x,t/x',t')$ é a função densidade de probabilidade (PDF) das partículas, que representa a probabilidade de uma partícula de fluido que estava em x' no tempo t' alcançar x no tempo t . A equação (1.3) representa uma descrição rigorosa dos processos de transporte e de difusão expressa em uma notação probabilística, onde o parâmetro chave é a função densidade de probabilidade (PDF). Para determinar a PDF é necessário liberar um número de partículas suficientemente grande, seguir suas trajetórias e calcular quantas delas

alcançam a vizinhança de x no tempo t . Portanto, se trajetórias reais das parcelas de ar podem ser obtidas, o cálculo simples da densidade dos pontos de trajetórias fornece uma estimativa da concentração (Stull, 1998). Segundo Zannetti (1990), vários tipos de modelos podem ser classificados como lagrangeanos. Entre eles então os modelos de caixa lagrangeanos, de pluma gaussiana-segmentada, modelos de *puff* gaussianos e modelos de partículas lagrangeanos. Nestes modelos, a evolução da pluma é representada por uma série de pacotes discretos (nuvens ou *puff*) de material poluente (Vicentini, 2011). Os modelos lagrangeanos de partículas são ferramentas cada vez mais utilizadas hoje em dia no estudo do transporte e dispersão de poluentes, e representam o estado da arte em termos de dispersão atmosférica. Estes modelos são baseados na equação generalizada de Langevin. A posição de cada partícula, em cada passo de tempo é obtida pela integração numérica das seguintes equações (Stull, 1998):

$$du_i = a(x_i, u_i, t)dt + b(x_i, u_i, t)dn \quad (1.4)$$

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i \quad (1.5)$$

onde u_i é a velocidade das partículas, x_i a variável espacial, t o tempo e dn uma variável randômica. O primeiro termo do lado direito da equação (1.4) é um termo determinístico representando o arrasto viscoso do escoamento sobre as partículas e o segundo, um termo estocástico representando acelerações randômicas causadas por flutuações de pressão (Stull, 1998).

Em 1988 Segal et al. (1988) utilizaram o modelo lagrangeano de partículas *Lagrangian Particle Dispersion Model* (LPDM) acoplado ao modelo atmosférico RAMS para simular o transporte e a dispersão de SO₂ na região sul da península da Flórida. Neste trabalho, os autores reconheceram que seria necessária uma verificação contra dados de observação para validar/melhorar o modelo.

Karam et al. (1996) utilizaram um sistema de modelos para simular a dispersão de um poluente na região de Candiota (RS). O modelo lagrangeano de partículas RDM (*Random Dispersion Model*), desenvolvido por Yamada e Bunker (1987), e o modelo TVM (*Tridimensional Vorticity Model*), desenvolvido por Bornstein et al. (1987) foram

empregados para simular a dispersão de SO₂ emitidos pela usina termoeétrica de Candiota (RS).

Carvalho (1999) utilizou o modelo lagrangeano estocástico de partículas SPRAY acoplado ao modelo numérico RAMS para simular a dispersão de um poluente, SF₆, liberado na atmosfera durante o experimento TRACT (*Transport of Air Pollutants over Complex Terrain*). Este experimento foi realizado com o objetivo principal de realizar estudos experimentais do transporte e difusão de poluentes sobre terreno complexo.

Outro modelo lagrangeano tipo *puff* encontrado na literatura foi o modelo *Hybrid Single Particle Lagrangian Integrated Trajectory Model* (HYSPLIT), desenvolvido em conjunto pelo ARL - *Air Resources Laboratory*, pertencente ao NOAA (*National Oceanic and Atmospheric Administration*), e pelo Departamento Australiano de Meteorologia (Draxler et al., 2012). Apesar de já ser reconhecido para o cálculo de dispersão e trajetória de poluentes em longas distâncias, o HYSPLIT não inclui efeitos de edificações, terrenos complexos e sua aplicação para fins regulatórios foi pouco testada (Hoinaski et al., 2013a) e (Hoinaski et al., 2013b).

1.2.3. Modelos Gaussianos

O modelo gaussiano é uma solução analítica do modelo euleriano, com coeficientes constantes. Talvez este seja o modelo mais antigo e também o mais usado dos modelos de dispersão atmosférica (Degrazia e Moraes, 1989). Supõe que a dispersão do poluente do ar tem uma distribuição gaussiana, significando que a distribuição do poluente tem uma distribuição normal da probabilidade. Os modelos gaussianos são os mais usados frequentemente para prever a dispersão das plumas contínuas que originam do nível do solo ou de fontes elevadas. Os modelos gaussianos podem também ser usados predizendo a dispersão das plumas não-contínuas da poluição de ar (chamados modelos *puff*) (Mello, 2010).

O modelo de pluma gaussiana pode ser derivado da equação de difusão-advecção em situações idealizadas. As concentrações são calculadas a partir da seguinte equação:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \alpha \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (1.6)$$

onde $C(x,y,z)$ é a concentração do poluente à sotavento da fonte no ponto (x, y, z) , x a distância horizontal da fonte, y a distância horizontal do eixo central da pluma, z altura do solo, Q vazão mássica de emissão (vazão de lançamento do gás), u velocidade média do vento, H altura efetiva da chaminé, σ_y o coeficiente de dispersão lateral e σ_z o coeficiente de dispersão vertical. Vários estudos foram elaborados com o objetivo de propor estimativas para estes parâmetros, como por exemplo os estudos de Sutton, 1947a), Sutton (1947b) e Gifford (1961). Estes coeficientes são dependentes da estrutura turbulenta da atmosfera. O modelo gaussiano é baseado em uma fórmula simples que descreve um campo de concentrações tridimensional gerado por uma fonte pontual elevada sob condições meteorológicas constantes (Figura 1.3).

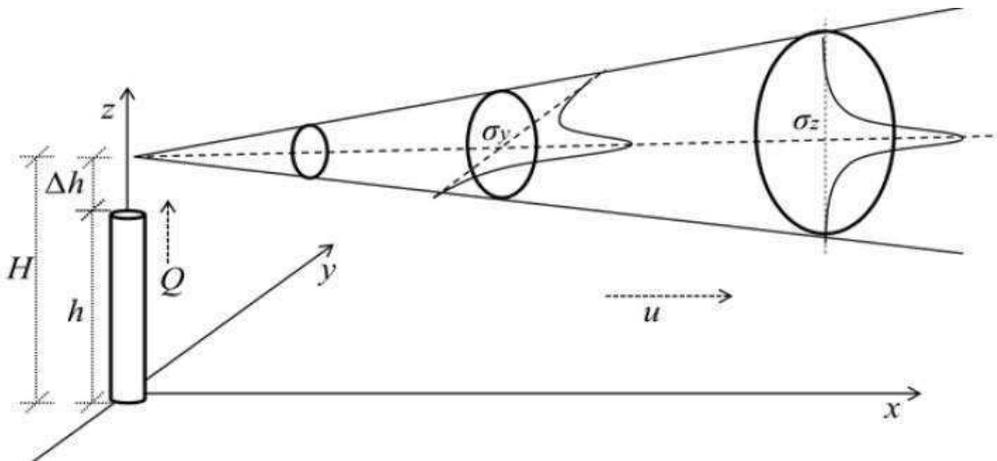


Figura 1.3 - Modelo de pluma gaussiana. (Hoinaski, 2015)

As condições de emissão também são consideradas como sendo constantes neste tipo de modelo. Os modelos de pluma gaussiana são largamente utilizados, mas tem muitas limitações físicas. Uma delas é que o terreno deve ser considerado plano. Eles são utilizados com frequência na predição de concentrações de contaminantes abandonados na camada limite planetária (CLP). Normalmente, em casos práticos de cálculo de concentração, a aproximação gaussiana incorpora parâmetros de dispersão associados às classes de estabilidade. O problema básico com estes esquemas simples de quantificação da turbulência é que eles abrangem uma faixa muito grande de condições de estabilidade. Em 1961 [Pasquill,1961] propôs o conceito de classes de estabilidade, que provaram ser muito úteis nos cálculos de dispersão atmosférica que utilizam o modelo de pluma gaussiana. Baseado nas classes de estabilidade de Pasquill, Gifford (1961) desenvolveu

as correlações mais largamente utilizadas para determinar os coeficientes de dispersão, conhecidas como as curvas de Pasquill-Gifford que relacionam σ_y e σ_z (coeficientes de dispersão horizontal e vertical respectivamente) com a distância da fonte e com a classe de estabilidade.

Em fevereiro de 1991, a agência de proteção ambiental dos Estados Unidos da América (EPA), em conjunto com a Sociedade Americana de Meteorologia (AMS) lançaram o modelo regulatório AERMOD (modelo com abordagem gaussiana) com o propósito de incorporar os avanços científicos produzidos nas décadas de 70 e 80. Este seria considerado o estado-da-arte entre os modelos de dispersão atmosférica para assuntos regulatórios. Para melhorar a parametrização da camada limite planetária (CLP), outros fatores como a interação da pluma com o terreno, rugosidade do terreno, interações com prédios e estruturas, relevos, e dispersões em áreas urbanas, foram considerados. As formulações do AERMOD são sumarizadas no trabalho de Perry et al. (1994) e Cimorelli et al. (1996). Outro trabalho de Cimorelli et al. (2003) também apresenta um detalhamento do modelo atual utilizado pelo AERMOD.

Em 2010, Mello (2010) apresentou, na sua tese de doutorado, um estudo titulado Simulação da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária Através da Solução da equação de Langevin Pelo Método de Decomposição. Neste trabalho é apresentada uma solução analítica para a equação de Langevin tridimensional e estocástica aplicada na dispersão de poluentes na atmosfera considerando as seguintes funções densidade probabilidade (PDF): Gaussiana, Bi-Gaussiana e Gram-Charlier. A solução é obtida usando o Método de Decomposição Adomian (ADM), que é um método para resolver equações diferenciais não-lineares sem linearização. O método de decomposição consiste na expansão da solução em série de funções e o termo não-linear em série de polinômios definidos por Adomian. Substituindo estas expansões na equação à ser resolvida, é construído um sistema linear recursivo, que é então resolvido de maneira analítica. Também é apresentado um estudo de estabilidade baseado na teoria de Lyapunov. Por fim, conclui-se que a PDF gaussiana é a distribuição apropriada para descrever o experimento de Copenhague, tomado no trabalho como referência para validar o modelo proposto.

Na tentativa de propor ajustes nos parâmetros (coeficiente de dispersão lateral) do modelo AERMOD, Hoinaski (2015) propôs uma formulação para corrigir o Erro Sistemático Médio (*Bias*) da dispersão lateral do AERMOD, contabilizando os efeitos do tempo de média em suas estimativas.

Outros autores também se desafiaram a elaborar trabalhos que contemplavam interfaces de outros modelos já desenvolvidos (utilizando também abordagem gaussiana). Neste caso, pode-se destacar ainda a tese de doutorado de Moraes (2004). Este trabalho teve como objetivo principal a implementação de uma ferramenta para a previsão do campo de vento e concentração de poluentes na microescala atmosférica. Para a obtenção deste objetivo, foram unificados através de uma interface totalmente concebida no SINMEC/UFSC. Esta interface foi testada e verificada utilizando dados reais e simulados de vento. Os modelos utilizados foram o *Advanced Regional Prediction System* (ARPS), *California Meteorological Model* (CALMET) e o *California Puff Model* (CALPUFF). Os resultados das simulações com os modelos ARPS e CALMET foram avaliados utilizando índices estatísticos, e apresentaram valores comparáveis aos encontrados na literatura. Os resultados obtidos para as concentrações de poluentes, como modelo CALPUFF, foram por sua vez, comparados com dados reais de concentração de poluentes.

Vários outros estudos foram desenvolvidos utilizando soluções analíticas da equação advecção-difusão. No campo da dispersão atmosférica, destacasse também as soluções obtidas através da técnica GITT (*Generalized Integral Transform Technique*). O GITT é um método híbrido analítico-numérico derivado da transformação integral clássica (Cotta, 1993 *apud* Weymar, 2016). Os principais trabalhos, utilizando esta técnica, consultados durante esta revisão foram: (Wortmann et al., 2005), (Moreira et al., 2006a), (Buske et al., 2007b), (Buske et al., 2007c), (Tirabassi et al., 2008), (Buske et al., 2007a), (Tirabassi et al., 2009), (Moreira et al., 2009a), (Moreira et al., 2009b), (Buske et al., 2010); (Schuch et al., 2011) e (Guerrero, 2012).

1.2.4. Modelos de Turbulência a Duas Equações

Com o avanço da Dinâmica dos Fluidos Computacionais - CFD, o entendimento da influência da turbulência no processo de dispersão atmosférica começou a ser investigado de forma mais minuciosa. Além do fenômeno da turbulência, foi possível iniciar uma investigação sobre outros parâmetros como o campo de velocidade do vento na região de interesse da CLP. Logo foram desenvolvidos modelos para fechamento dos termos turbulentos. Desta forma, os modelos a duas equações, em especial o modelo k - ϵ padrão, passaram a ser amplamente utilizado pela sua simplicidade.

No estudo de Dawson et al. (1991), já citado anteriormente, foi utilizado o modelo k - ϵ padrão aplicado nos códigos computacionais chamados TEMPEST e PEST. Na

ocasião, foram propostas duas equações. A primeira consiste na modificação do valor da constante C_μ de forma a levar em consideração os efeitos da camada superficial. A segunda modificação consiste em alterar o valor da constante na equação de transporte da dissipação da energia cinética turbulenta para representar melhor escalas de comprimento característico de turbulência na região acima da camada superficial.

Na sua tese de doutorado, Boçon (1998) também aplicou um modelo $k-\varepsilon$ isotrópico e outro anisotrópico. Tomando também como base a revisão bibliográfica feita por Boçon (1998) pode-se consultar o trabalho de Koo (1993), que propôs um $k-\varepsilon$ modificado não isotrópico para levar em conta as diferentes difusividades turbulentas.

O trabalho de PFluck (2010) também faz uma extensa revisão bibliográfica específica sobre o modelo $k-\varepsilon$ padrão. Este foi o caminho até os trabalhos de Castro e Apsley (1997), que propuseram modificações no modelo $k-\varepsilon$ para simular atmosfera neutra e estável, as quais foram batizadas como “modificação de curvatura” e “modificação da dissipação”. Encontramos também o trabalho de Baklanov (2000) que apresenta uma espécie de “guia de boas práticas” para a modelagem e simulação da dispersão de poluentes em terrenos complexos e atmosfera estável, abordando a escolha do modelo de turbulência, condições de contorno para os perfis verticais de vento e efeitos de radiação térmica, entre outros.

Vários outros autores também aplicaram modelos a duas equações para simulações de dispersão de poluentes em *canyons* urbanos ou centros urbanos. Nestes casos se destacam os trabalhos desenvolvidos aplicando o RNG $k-\varepsilon$ por exemplo: (Baker et al., 2004), (Liu et al., 2005), (Li et al., 2006) e (Dixon et al., 2006).

Mesmo sendo amplamente usado na modelagem de emissões atmosférica, o modelo $k-\varepsilon$ apresenta uma inconsistência numérica quando o escoamento ocorre próximo da parede do domínio (escoamento a baixo Reynolds) fato este associado a representação inadequada da viscosidade turbulenta nesta região. Desta forma, vários autores se lançaram no desafio de propor modelos e funções que corrigissem essa discrepância. O modelo de Launder-Sharma (1974) é um dos modelos de número de Reynolds baixos (LRN) mais antigo e mais amplamente utilizado e demonstrou estar em concordância com o experimental e o DNS para uma gama de problemas de fluxo turbulento, tendo um melhor desempenho do que muitos outros modelos LRN $k-\varepsilon$. No entanto, alguns estudos recentes, incluindo aqueles que usam CFD, concluem resultados não muito precisos quando comparados com resultados experimentais (Mathur, 2013). Em sua pesquisa

Mathur (2013) implementou o modelo definido por Launder-Sharma (1974) em FLUENT utilizando funções definidas pelo autor (UDFs) e seu desempenho na previsão de fluxos turbulentos estáveis e instáveis. O modelo foi testado e conclui que os resultados apresentaram concordância com outras pesquisas que utilizaram códigos de CFD. No entanto, o modelo proposto pelo autor, fazendo uso de funções definidas é muito diferente do modelo que aplicou puramente a função definida por Launder-Sharma (1974). O primeiro concorda bem com dados experimentais e com simulações numéricas diretas (DNS), enquanto que o segundo não. Além disso, o UDF é usado para demonstrar que as previsões do modelo são muito sensíveis à interpretação da formulação do modelo.

Reeuwijk e Hadžiabdić (2015) aplicaram Simulação Numérica Direta (DNS) e o conceito de Média de Reynolds-Navier-Stokes (RANS) para realizar simulações de um fluxo de canal turbulento plano com alto número de Schmidt para transferência de massa. O DNS, que considera escalares passivos com números de Schmidt entre 1 e 50, foi usado para analisar o coeficiente de transferência de massa K e o comportamento da turbulência próximo da parede. Os autores propuseram uma parametrização para o número de Schmidt turbulento, que variou fortemente muito perto da parede. As simulações de RANS, que consideraram números de Schmidt entre 1 e 500, foram realizadas com o modelo k - ϵ de número baixo-Reynolds de Launder-Sharma, o modelo ζ - f e o modelo de mistura elíptica. Os autores mostraram que os valores de K preditos pelo modelo ζ - f e o de mistura elíptico apresentaram resultados razoavelmente bem de acordo com as correlações numéricas e experimentais disponíveis, mesmo sem a nova parametrização para o número de Schmidt turbulento. O modelo Launder-Sharma divergiu significativamente na previsão de K . Fato este associado a valores incorretos da viscosidade turbulenta perto da parede. Os autores propuseram uma modificação simples da função de amortecimento f_μ para o modelo de Launder-Sharma melhorando significativamente a previsão de K .

Edeling et al. (2014) definiu estimativas para o erro em simulações de Média de Reynolds - Navier-Stokes (RANS) baseadas no modelo de fechamento de turbulência k - ϵ de Launder-Sharma, para uma classe limitada de fluxos. Em particular, as estimativas foram baseadas em incertezas dos coeficientes de fechamento do modelo, para os fluxos de parede limitados em uma variedade de gradientes de pressão favoráveis e adversos. Para estimar a faixa de coeficientes de fechamento que reproduz esses fluxos com precisão, realizaram treze calibrações separadas, cada uma com um gradiente de pressão diferente, usando perfis de velocidade de camada limite medidos e um modelo estatístico

contendo um termo de inadequação de modelo multiplicativo no espaço da solução. Os resultados foram treze distribuições posteriores conjuntas sobre coeficientes e hiperparâmetros. Para resumir esta informação, calcularam os intervalos de Densidade Posterior Mais Elevada (HPD), e subsequentemente representaram a incerteza de solução total com uma caixa de probabilidade (*p-box*). Esta *p*-caixa representa a variabilidade de parâmetros entre fluxos e a incerteza epistêmica dentro de cada calibração. Uma previsão de um novo fluxo de camada limite foi feita com barras de incerteza geradas a partir dessa informação de incerteza, e a estimativa de erro resultante foi mostrada como consistente com os dados de medição.

No estudo de Igci e Arici (2016) o fluxo turbulento completamente desenvolvido e a transferência de calor em um duto foram investigados numericamente. As equações governantes foram resolvidas usando o método de controle volume-finito juntamente com grades escalonadas não uniformes. Os termos de velocidade e pressão das equações de momentum foram resolvidos pelo algoritmo SIMPLE. Um algoritmo de matriz cíclica tri-diagonal (TDMA) foi aplicado para aumentar a taxa de convergência da solução numérica. Na análise foram utilizadas quatro versões do modelo $k-\varepsilon$ de baixo número de Reynolds: (Launder-Sharma, 1974), (Lam-Bremhorst, 1981), (Chien, 1982) e (Abe-Kondoh-Nagano, 1994). Os resultados obtidos utilizando os modelos testados foram analisados comparativamente com alguns resultados experimentais encontrados na literatura. Os autores concluíram que todos os modelos testados falharam na região separada logo atrás das nervuras, onde as tensões turbulentas são subprevistas. Os números locais de Nusselt foram superestimados por todos os modelos considerados. No entanto, o modelo Abe-Kondoh-Nagano apresentou previsões de transferência de calor mais realistas.

Zhang et al. (2016) desenvolveram um modelo $k-\varepsilon$ de baixo Reynolds baseado em um novo parâmetro de estrutura turbulenta e uma função recalibrada de amortecimento de parede (WDF). Para explicar o efeito da variação do número de Reynolds no valor máximo do WDF, uma relação entre dois números de Reynolds turbulentos diferentes foi definida no WDF. Além disso, em vez de usar uma relação constante entre o esforço de cisalhamento de Reynolds e a energia cinética turbulenta, um novo parâmetro de estrutura turbulenta foi proposto com base em vários conjuntos de dados de simulação numérica direta (DNS). A dedução do comportamento assintótico próximo da parede foi realizada para provar que o novo modelo proposto podia produzir um valor de parede correto para a viscosidade turbulenta. O novo modelo foi validado com vários tipos de fluxo, e os

resultados de rendimento apresentaram-se de acordo com os dados experimentais. Além disso, três modelos de turbulência frequentemente utilizados também foram envolvidos nas comparações e os resultados indicaram que o novo modelo oferece notável melhora nos fluxos em não equilíbrio.

No trabalho de Wray e Agarwal (2015), um novo modelo de viscosidade de turbulência de uma equação é derivado do fechamento $k-\omega$. A equação ω utilizada nesta derivação inclui um termo de difusão cruzada que permite que o novo modelo alterne entre as propriedades do modelo apresentadas pelos modelos de turbulência $k-\omega$ ou $k-\varepsilon$ de duas equações. Além disso, a função de amortecimento usada em conjunto com o modelo de uma equação proposto não foi estudada anteriormente na literatura. O novo modelo foi usado para simular vários fluxos de referência envolvendo tanto a camada livre de cisalhamento como os fluxos turbulentos com limites de parede com pequenas regiões de separação. O software “*open-source*” (OpenFOAM) foi usado para cálculos de campo de fluxo. Os autores demonstraram que o novo modelo melhora a precisão das simulações de fluxo em comparação com o amplamente utilizado modelo de uma equação Spalart-Allmaras e é competitivo com o modelo $k-\omega$ de transporte de tensão de cisalhamento.

1.3. Objetivos da Tese

Apesar do modelo $k-\varepsilon$ ser amplamente utilizado na modelagem e simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, percebe-se uma lacuna na aplicação de equações que corrigem a viscosidade turbulenta do modelo $k-\varepsilon$ aplicado no estudo de dispersões atmosféricas. Todos os estudos onde foram aplicadas as equações de correção da viscosidade turbulenta (também conhecidas como funções amortecimentos) foram desenvolvidos em análise micro escalar com escoamento em dutos, placas, etc. Para um escoamento onde a camada limite (planetária) é da ordem de aproximadamente 2 km (microescala atmosférica), uma altura de apenas 2 metros pode ser considerada próximo a parede (em proporção). Em escoamentos ambientais o caráter não isotrópico da turbulência é notável, especialmente nos escoamentos atmosféricos. Esta anisotropia é particularmente importante no caso da dispersão de um escalar (poluente) no escoamento. Para o caso de escoamentos estavelmente estratificados, por exemplo, flutuações verticais são inibidas devido às forças de empuxo (oriundas do gradiente positivo de temperatura na direção vertical), enquanto flutuações horizontais não são. Mesmo escoamentos

atmosféricos não estratificados (neutros) apresentam alguma anisotropia. Desta forma, não se pode esperar que modelos isotrópicos possam reproduzir bem a difusão turbulenta não isotrópica.

Desta forma, modelos de dispersão atmosféricas desenvolvidos em CFD, com aplicação do modelo k - ϵ padrão, precisam ser investigados em relação ao comportamento da viscosidade turbulenta com funções de amortecimento, a fim de garantir que os resultados das simulações estejam em concordância com resultados experimentais de campo.

Com isso, o objetivo geral deste trabalho é desenvolver em CFD um modelo de dispersão atmosférico, utilizando o modelo de turbulência k - ϵ padrão, com funções de amortecimento específicas, que permitam simular um ambiente atmosférico com variações diversas de estabilidade. Os objetivos específicos são:

- 1) Descrever os mecanismos envolvidos no transporte das emissões atmosféricas para fontes pontuais de lançamento (chaminés);
- 2) Desenvolver um modelo que possua um domínio único de solução que possa ser utilizado para vários experimentos em condições de estabilidade atmosférica diferentes;
- 3) Desenvolver um modelo onde o perfil de velocidade não precise ser ajustado para cada classe de estabilidade atmosférica;
- 4) Investigar e propor equações empíricas para a correção da viscosidade turbulenta próxima a “parede” de escoamento e que corrija a isotropia do modelo k - ϵ ;
- 5) Simular o modelo considerando experimentos de campo, e outras referências, para validação e análise crítica.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA – DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

A concentração de uma determinada substância na atmosfera varia no tempo e no espaço em função de reações químicas e/ou fotoquímicas, dos fenômenos de transporte, de fatores meteorológicos (ventos, turbulências e inversões térmicas) e da topografia da região. Para isso, as condições meteorológicas têm um papel determinante na descrição físico-química do transporte de poluentes entre a fonte e o receptor (Lisboa, 2015). Neste capítulo serão descritos os principais fatores que influenciam na dispersão de poluentes na atmosfera para que sejam feitas as devidas considerações e simplificações na modelagem matemática proposta no capítulo posterior.

2.1. A Estabilidade Atmosférica

A capacidade dispersiva turbulenta da atmosfera é determinada pela energia e tamanho de seus movimentos turbulentos. Esta capacidade é convenientemente descrita como uma propriedade chamada “estabilidade atmosférica” (*KANS report, Department of Conservation & Environmental of Australia, 1982*).

Em termos simples, a estabilidade da atmosfera é a sua tendência a resistir ou intensificar o movimento vertical, ou alternativamente suprimir ou aumentar a turbulência existente. O grau de turbulência na baixa atmosfera depende fortemente do gradiente vertical de temperatura, embora este seja também influenciado pela rugosidade do terreno, velocidade do vento e efeitos da viscosidade (cisalhamento). Embora não sejam completamente equivalentes os termos “estabilidade atmosférica” e “turbulência atmosférica” são considerados permutáveis em se tratando de difusão atmosférica (Lisboa, 2015).

A atmosfera é dita muito estável quando há pouco ou nenhum movimento turbulento presente. Tais circunstâncias ocorrem frequentemente, por exemplo, nas noites calmas em que o ar frio cai. Em resfriamento, o ar torna-se mais denso e então é inibido de misturar com o ar mais leve acima. Com a continuação do resfriamento, através da noite, resultará numa camada de centenas de metros. Em tal condição estável, a temperatura pode aumentar com a altura (ao contrário do seu decréscimo durante o dia) produzindo o que é chamado “inversão de temperatura”. O caso particular do caso acima

é também chamado de “inversão de radiação” (KANS *Report, Department of Conservation & Environmental of Australia*, 1982).

Uma atmosfera instável é encontrada em dias de sol onde após várias horas de aquecimento a temperatura do ar ao nível do solo torna-se muito maior que a massa de ar acima. O ar imediatamente torna-se menos denso e levanta-se formando termas discretas. Desta forma, o ar adjacente ao do solo é continuamente misturado até alturas de centenas ou milhares de metros.

Condições atmosféricas neutras, caso intermediário entre o estável e instável, ocorre quando o aquecimento e o resfriamento do solo são relativamente fracos. Condições neutras são caracterizadas pela ocorrência de um perfil vertical de temperatura adiabático (aproximadamente constante com a altura). Estas condições ocorrem geralmente durante as transições do dia para noite e vice-versa, em dias nublados, ou com fortes ventos (com velocidades maiores do que 6 m/s) (Lisboa, 2015).

O comportamento da pluma de dispersão das chaminés é totalmente correlacionado com o tipo de condição atmosférica do momento. Sob condições estáveis, a pluma dispersa muito vagorosamente e concentrações ao nível do solo podem não ser registradas dentro de uma distância de 5 km ou mais da fonte.

Sob condições neutras, a pluma dispersa com uma taxa moderada sendo que o máximo da concentração registrada ao nível do solo será registrado a poucos quilômetros da fonte. O comportamento de plumas em condições instáveis é muito errático, a dispersão é rápida e concentrações podem ser registradas ao nível do solo dentro de algumas centenas de metros da fonte.

O método mais comum para caracterizar a estabilidade atmosférica, e a turbulência existente presente, foi desenvolvido por Pasquill em 1961. Ele caracterizou a turbulência atmosférica em seis classes chamadas classes A, B, C, D, E e F, sendo a classe sendo a mais instável e turbulenta, e F a mais estável e menos turbulenta. A Tabela 2.1 lista as seis classes e na Tabela 2.2 prover as condições meteorológicas que defini cada classe.

Tabela 2.1 – Classe de estabilidade de Pasquill

| Estabilidade da Classe | Definição | Estabilidade da Classe | Definição |
|------------------------|--------------------|------------------------|-------------------|
| A | Muito instável | D | Neutra |
| B | Instável | E | Levemente estável |
| C | Levemente instável | F | Estável |

Tabela 2.2 – Condições meteorológicas que definem a estabilidade de Pasquill

| Velocidade Superficial | | Dia – Radiação Solar Incidente | | | Noite | |
|------------------------|---------|--------------------------------|----------|------|-------|-------|
| m/s | mi/h | Forte | Moderado | Leve | > 50% | < 50% |
| < 2 | < 5 | A | A – B | B | E | F |
| 2 – 3 | 5 – 7 | A – B | B | C | E | F |
| 3 – 5 | 7 – 11 | B | B – C | C | D | E |
| 5 – 6 | 11 – 13 | C | C – D | D | D | D |
| > 6 | > 13 | C | D | D | D | D |

2.2. Influência dos Ventos

A velocidade do vento e a sua turbulência têm grande influência sobre a dispersão dos poluentes na atmosfera. A Figura 2.1 mostra a circulação geral dos ventos na atmosfera terrestre. As causas do aparecimento dos ventos são as seguintes:

- 1) Distribuição desigual da energia pelas variações na insolação em diferentes latitudes;

- 2) Forças de Coriolis: na superfície da Terra, um objeto localizado no Equador tem uma velocidade tangencial maior que um outro localizado numa região temperada.

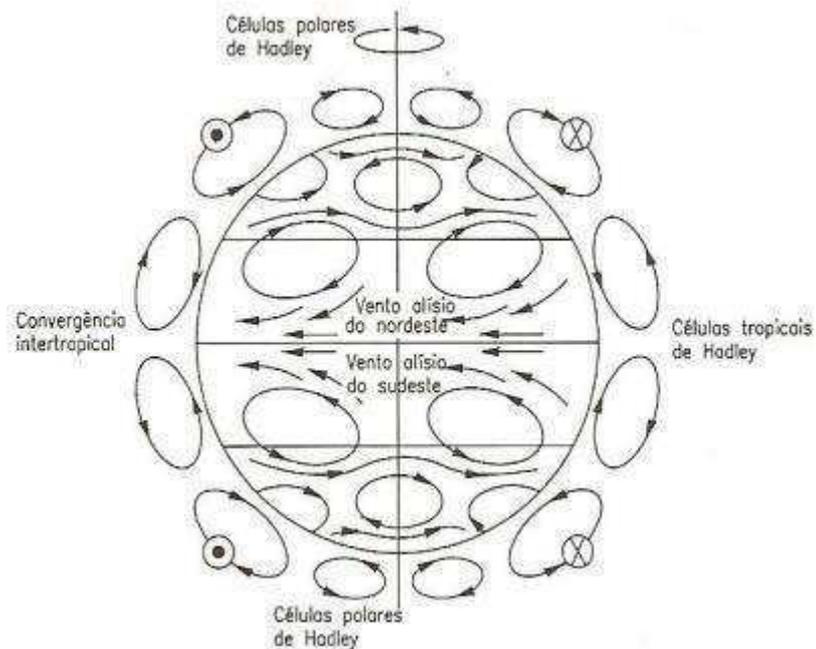


Figura 2.1 – Circulação geral dos ventos na atmosfera (Lorerdo-Soura, 2004)

Do ponto de vista da movimentação do ar, a atmosfera divide-se nas seguintes camadas:

- 1) Camada limite planetária: Vai desde a superfície da terra até uma altura de 500m. os fatores que determinam a velocidade e direção do vento nesta camada são: gradiente de pressão horizontal, o esforço de cisalhamento, e a força de coriolis;
- 2) Camada geostrófica: Nesta camada, a velocidade e direção do vento determinam-se só pelo gradiente de pressão horizontal e pela força de coriolis, portanto não é preciso considerar o efeito da superfície.

A direção inicial do transporte dos poluentes originados de uma fonte é determinada pela direção do vento medido no local da fonte. A concentração de poluentes, originados de fontes pontuais, é provavelmente mais sensível a direção do vento do que qualquer outro parâmetro (Moares, 2001). Uma mudança de apenas 5° na direção da velocidade do vento pode causar uma redução de até 90% dependendo da condição da atmosfera, na concentração medida por um receptor alinhado com a direção original (Boubel, 1994).

2.3. Influência da Inversão Térmica

Os problemas de dispersão de poluentes tornam-se mais críticos durante o inverno, quando a ocorrência de inversões térmicas é mais frequente. Durante uma inversão, os poluentes ficam aprisionados numa região próxima ao solo, em uma camada de ar estável altamente estratificada que dificulta a dispersão, aumentando sensivelmente a concentração dos contaminantes. Este fenômeno é comum em manhãs frias de inverno com pouco vento e muitas nuvens.

As condições meteorológicas podem causar uma inversão no esquema normal de variação da temperatura na troposfera. O resultado é a formação de uma “capa de inversão”. O efeito resultante é a colocação de uma massa de ar frio por baixo de outra de ar mais quente. A presença de uma capa de inversão impede a circulação atmosférica vertical, já que o ar mais frio não pode acender através da capa quente de inversão. Os contaminantes lançados no ar são confinados na capa inferior da inversão. Estas situações podem permanecer invariáveis durante dias, até que as condições atmosféricas mudem e a capa de inversão se destrua (Boçon, 1998).

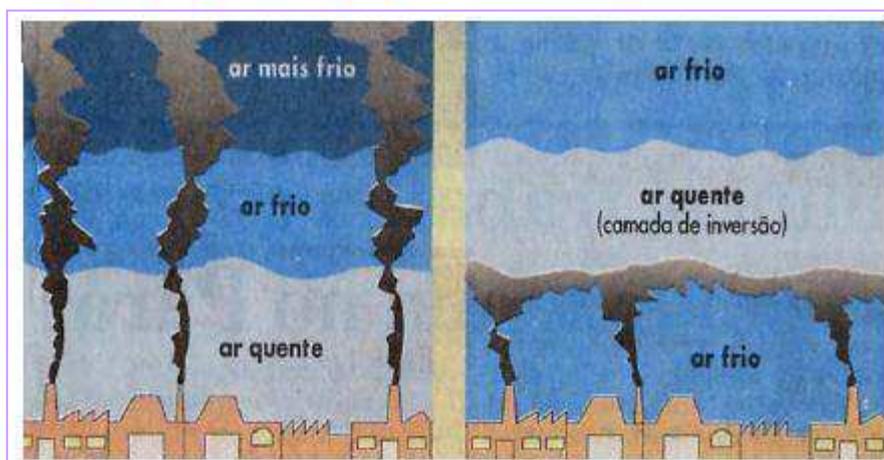


Figura 2.2 – Representação de uma inversão térmica (Lisboa, 2005)

2.4. Influência da Topografia

Variações topográficas na configuração da superfície afetam tanto a linha central da trajetória como a difusão da pluma de uma fonte. A linha central da trajetória pode ser fortemente distorcida e ter direções completamente diferentes da direção do vento acima da superfície. Este é geralmente o caso das regiões de vale. O efeito da topografia na difusão da pluma é determinado por características localizadas de configurações da superfície (Stern, 1976).

A topografia complexa influencia a trajetória e a difusão da pluma. Embora ocorram altas concentrações de poluentes em terreno complexo, como por exemplo, na situação em que uma pluma intercepta uma montanha, muitos processos físicos agem no sentido de reduzir as concentrações.

Os terrenos planos são aqueles sem nenhum tipo de elevação na vertical, ou com elevações que não influenciam significativamente o escoamento ao seu redor, gerando recirculações. Já os terrenos complexos são aqueles onde elevações verticais são significativas a ponto de influenciar o escoamento atmosférico ao seu redor, gerando recirculações. As principais situações que podem aumentar as concentrações em terreno complexo são: encontro da pluma com montanhas, acúmulo de poluentes em vales, arrasto dos poluentes para centros urbanos devido ao fenômeno da canalização do vento pelos vales (Carvalho, 1996).

2.5. A Camada Limite Atmosférica - CLA

O conceito de Camada Limite em fluidodinâmica pode talvez ser atribuído a Froude (1870), que realizou uma série de experimentos em laboratório, no início de 1870, para estudar a resistência da fricção de uma placa plana fina quando arrastada em água parada. O termo foi provavelmente primeiro introduzido na literatura por (Prandtl, 1905) trabalhando no campo da aerodinâmica.

No contexto de atmosfera, a camada limite atmosférica (CLA) é definida como a camada de ar diretamente a cima da camada da terra na qual sofre interferência dos efeitos da superfície (fricção, calor e resfriamento) em um tempo-escala menor que um dia, e sob a qual ocorrem fluxos significativos de momento, calor e massa devido aos movimentos turbulentos (Garrat, 1994).

Stull (1998) define a cama limite como sendo parte da troposfera que é diretamente influenciada pela superfície terrestre e responde aos forçantes superficiais,

térmicos e mecânicos, com escala de tempo de uma hora ou menos. Estes forçantes incluem arrastos por fricção, evaporação, transferência de calor, emissão de contaminantes e modificação do escoamento induzidas pelo terreno. A espessura da camada limite é variável na escala de tempo e espaço, mas varia de centenas de metros a poucos quilômetros.

A estrutura da CLA sobre o continente é fortemente influenciada pelo ciclo diário de aquecimento e resfriamento do solo. A Figura 2.3 mostra uma estrutura típica que se desenvolve ao longo de um dia. Os três componentes que mais se destacam nessa estrutura Stull (1988) são: a camada de mistura (*convective mixed layer*, durante o dia), a camada residual e a camada estável (durante a noite).

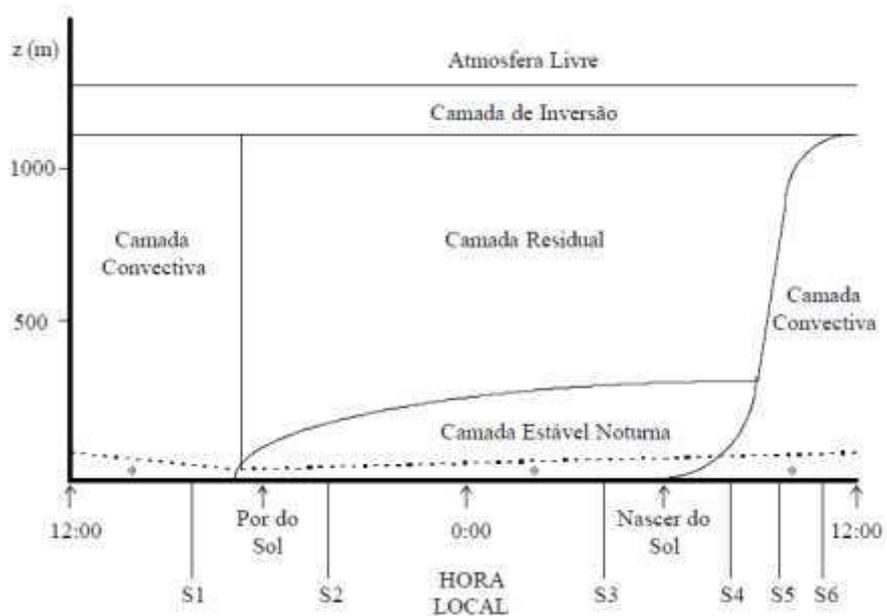


Figura 2.3 - Estrutura da camada limite atmosférica (CLA) ao longo do dia. (Boçon, 1998)

À noite, com ventos fracos, a espessura da camada turbulenta é muito menor que durante o dia, até menos de 100 m. A influência do resfriamento do solo, que ocorre durante a noite por emissão de radiação infravermelha, é a causa desta diminuição da espessura da camada turbulenta, ou camada de mistura (*mixing layer*). Com o solo mais frio, há um fluxo de calor da atmosfera para este, originando um gradiente vertical positivo de temperatura, ou seja, uma camada de ar estavelmente estratificada próxima do solo. Esta camada, que é denominada de camada limite estável noturna, cresce durante toda a noite.

Quando amanhece, a superfície é aquecida pela radiação solar e sua temperatura cresce atingindo um máximo por volta das 12 às 14 horas. A camada de ar acima do solo recebe um fluxo de calor da superfície e se aquece também, resultando num gradiente vertical negativo de temperatura que vai destruindo a camada estável noturna. Esta nova camada instável que vai se formando tem nível de intensidade turbulenta alto (devido aos efeitos de cisalhamento e empuxo expressivos próximo ao solo) e aumenta de espessura durante todo o período matutino, acompanhando o aumento da temperatura do solo.

À tarde a temperatura do solo começa a diminuir e também o faz a altura da camada turbulenta. Em tardes de vento, particularmente com nuvens espessas, a CLA é completamente turbulenta e sua altura é determinada pela velocidade do vento e a rugosidade da superfície (Boçon, 1998).

Para qualquer velocidade do vento, o número de Reynolds associado com a CLA é tão grande, que se espera que o escoamento seja turbulento. Para ventos fortes, com velocidades médias horárias superiores a 10 m/s, o escoamento é suficientemente turbulento para que a mistura produzida suprima os efeitos térmicos e a CLA possa ser tratada como sendo adiabática e neutralmente estável (Lorerdo-Soura, 2004).

A turbulência é um processo físico através do quais perturbações infinitesimais das partículas de fluido são amplificadas exponencialmente devido a instabilidades dinâmicas do escoamento. Essa condição de instabilidade ocorre quando os termos viscosos, responsáveis pela dissipação térmica da energia, são muito menores que os termos não lineares das equações básicas.

A importância da turbulência atmosférica reside no fato que esta representa um processo bastante efetivo de transporte. Isto é uma consequência da intensa variabilidade das componentes da velocidade turbulenta, que proporciona uma constante mistura entre camadas adjacentes de fluido que, assim, têm suas propriedades misturadas. Este é um processo análogo àquele que causa difusão molecular de quantidades devido à agitação térmica das moléculas. Entretanto, como a intensidade das flutuações turbulentas é muito maior do que aquela que caracteriza a agitação molecular, o transporte turbulento também é muito mais efetivo que o molecular (Moraes e Acevedo, 2004).

Desta forma, como a superfície terrestre é dominada pela turbulência, o entendimento de fenômenos de transporte próximos à superfície está diretamente relacionado a uma adequada caracterização dos fluxos turbulentos (Moraes e Acevedo, 2004).

A transferência de quantidade de movimento na CLA é dada, fundamentalmente, pelas tensões aparentes de Reynolds ou tensões turbulentas, $-\rho_{ar}\overline{UW}$. O comportamento desta tensão define duas camadas dentro da CLA: a camada superficial e a camada de Ekman. A camada superficial é aquela região da CLA próxima da superfície, onde os fluxos e tensões variam menos que 10% de seu valor médio. Dentro desta camada, pode-se identificar uma fina subcamada, chamada subcamada interfacial ou micro camada, onde o transporte molecular domina frente ao transporte turbulento. A espessura desta subcamada é chamada de “deslocamento do plano-zero” e notada por z_d (Figura 2.4) (Lorerdo-Soura, 2004).

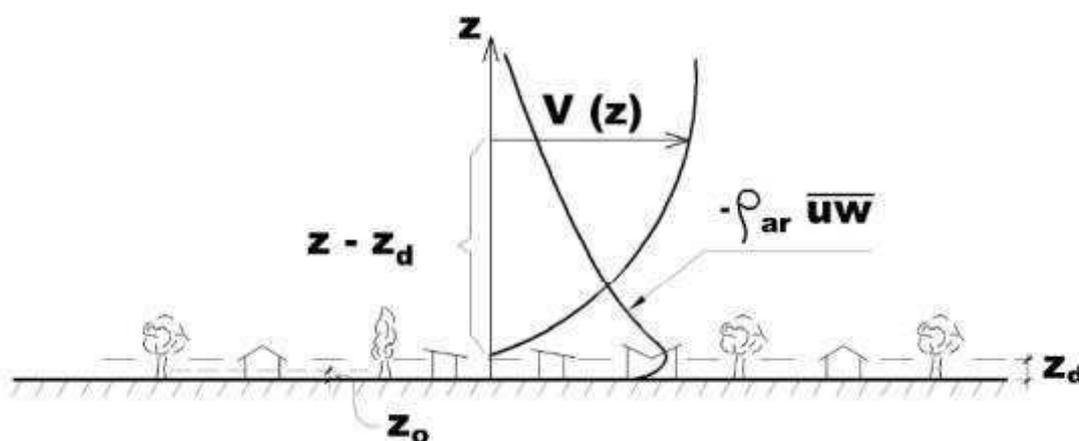


Figura 2.4 - Esquema dos perfis de velocidades médias e tensões de Reynolds da CLA e alturas características (Lorerdo-Soura, 2004)

Para os casos de cidades, onde a rugosidade está dada pelos edifícios e vegetação, o vento tende a passar por cima dos mesmos e se estabelecem regiões de estagnação (abrigadas) entre eles. O “deslocamento do plano-zero” corresponde à altura média dos edifícios. O escoamento entre os edifícios é local e inteiramente dependente da geometria e não podem ser estabelecidas características gerais.

Quando a rugosidade superficial é pequena (como em campo aberto e mar), o valor de z_d não é significativo. A camada de Ekman apresenta um decréscimo das tensões de Reynolds com a altitude, até elas praticamente se anularem na região da altura gradiente. Outras forças que atuam nesta camada são as forças de pressão e a força de coriolis devida à rotação da Terra (Lorerdo-Soura, 2004).

As tensões de Reynolds são máximas, $-\rho_{ar}\overline{UW}_{max}$, para a altura do deslocamento do plano zero, z_d , e a tensão de cisalhamento τ_0 é transmitida através da subcamada interfacial. A tensão τ_0 pode ser escrita por:

$$\tau_0 = \rho_a u_*^2 = \rho_{ar}\overline{UW}_{max} \quad (2.1)$$

2.5.1. Perfil de Velocidade e Temperatura na CLP

A teoria de Monin-Obukov apresenta uma relação para o perfil vertical de velocidade na camada superficial atmosférica dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{u_*}{kz} \Phi_m \left(\frac{z}{L} \right) \quad (2.2)$$

onde Φ_m é uma função universal dependente só da estabilidade atmosférica, obtida a partir de extensos experimentos de campo. Para condições instáveis a relação mais usada é (Bussinger et al., 1971):

$$\Phi_m = \left(1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{-1/4} \quad (2.3)$$

Para condições neutras $\Phi_m = 1$, e para condições estáveis

$$\Phi_m = 1 + 4.7 \frac{z}{L} \quad (2.4)$$

Panofsky e Dutton (1984) comentam que a constante em (2.4) pode variar de 4,7 a 5,2 e sugere o valor 5. Uma vez conhecida Φ_m (2.2) pode ser integrada desde $z = z_0$ (onde $u = 0$) até z , resultando uma expressão para a velocidade na direção vertical, na camada superficial:

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \Psi_m \left\{ \frac{z}{L} \right\} \right] \quad (2.5)$$

Para condições estáveis tem-se:

$$\Psi_m = \frac{4,7}{L} (z - z_0) \quad (2.6)$$

Para condições neutras $\Psi_m = 0$, e para condições instáveis

$$\Psi_m = \ln \left[\frac{(n_0^2 + 1)(n_0 + 1)^2}{(n^2 + 1)(n + 1)^2} \right] + 2(\tan^{-1}(n) - \tan^{-1}(n_0)) \quad (2.7)$$

onde:

$$n_0 = 1 - 15 \left(\frac{z_0}{L} \right)^{\frac{1}{4}} \quad \text{e} \quad n = 1 - 15 \left(\frac{z}{L} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (2.8)$$

Para a temperatura na camada superficial, a teoria da similaridade de Monin-Obukhov fornece (Panofsky e Dutton, 1984):

$$\frac{\theta - \theta_0}{T_*} = \frac{1}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \Psi_m \left\{ \frac{z}{L} \right\} \right] \quad (2.9)$$

onde:

$$T_* = \frac{-H}{\rho c_p u_*} \quad (2.10)$$

A função Ψ_k é dada de acordo com a estabilidade atmosférica. Para a atmosfera neutra, $\Psi_m = 0$. Para a atmosfera estável tem-se:

$$\Psi_k = 2 \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - 16 \frac{z}{L}} \right) \right] \quad (2.11)$$

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste capítulo será apresentada a modelagem matemática proposta pelo autor para o problema em estudo. O capítulo apresenta todas as equações governantes do modelo de dispersão atmosférica no formato que elas serão tratadas no código computacional, com as devidas considerações teóricas. Portanto, apresenta todas as equações fundamentais de transporte: massa, energia e movimento (*momentum*) a partir das equações da mecânica dos fluidos (continuidade, Navier-Stokes e energia) na sua forma geral.

Serão apresentadas também as equações para fechamento dos termos de turbulência, bem como as considerações feitas em relação ao fenômeno do escoamento próximo a parede do domínio, e da tratativa dada para a viscosidade turbulenta nesta região, apresentando desta forma as funções de amortecimento empírica propostas pelo autor.

3.1. Considerações Iniciais

- 1) A dispersão atmosférica ocorre dentro de um domínio de solução caracterizado por um prisma regular delimitado na parte inferior pela topografia do terreno, e na parte superior pela altura da CLP. As fronteiras laterais são compostas por duas saídas e duas entradas.
- 2) As faces de menor área do prisma ilustram a entrada e saída principal do fluxo de vento. As outras duas laterais formam a outra saída e entrada, caracterizando assim um prisma que comporta a decomposição escalar do vento. A fronteira inferior é delimitada pela topografia do terreno.
- 3) Dispersão de poluentes em um cenário mono-componente;
- 4) Modelo do problema em regime transiente;
- 5) Modelo Não-Isotérmico;
- 6) Desconsideradas as influências da umidade absoluta do ar, da evaporação e condensação de água na atmosfera;
- 7) Incompressibilidade do ar atmosférico e ação de forças de campo;
- 8) Inexistência de reações químicas do poluente analisado;
- 9) Inexistência de deposição úmida.

3.2. Equações de Conservação

A descrição de um fluido em movimento obedece a três leis físicas que são fundamentais e que regem a fluidodinâmica, conforme exposto pela Tabela 3.1.

Estas três leis básicas fundamentais, de forma análoga, podem ser trabalhadas através de balanços em volumes de controle infinitesimais, de forma a obter a respectiva equação de transporte para cada princípio físico. Tais equações, depois de obtidas, podem ser utilizadas tanto em regime laminar quanto em regime turbulento. Entretanto sabe-se que, para propósitos de cálculos na engenharia, resolver estas equações na forma em que são apresentadas é próximo do impraticável pelo simples fato da tecnologia atual não resolvê-las com precisão e tempo computacional satisfatórios. Assim, geralmente é introduzido o conceito de decomposição em propriedades médias, sendo mais comum o procedimento convencional de médias temporais (*Reynolds Average*).

Tabela 3.1 - Fundamentos da fluidodinâmica

| Leis Básicas | Equações Fundamentais |
|-------------------------------|-------------------------|
| Lei da Conservação de massa | Equação da Continuidade |
| Segunda lei de Newton | Equação do Movimento |
| Primeira lei da Termodinâmica | Equação da Energia |

Nas seções seguintes, as equações de conservação média da massa, movimento, energia e espécies químicas são derivadas. Primeiramente serão visualizadas as equações para as quantidades instantâneas, passando em seguida para as equações médias pelo método da média temporal (*Reynolds Average*).

3.2.1. Conservação da Massa

A equação que representa a conservação da massa, também conhecida como equação da continuidade, pode ser obtida analisando a taxa mássica de escoamento, em regime transiente, que entra e sai de um elemento infinitesimal de volume:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (3.1)$$

onde ρ representa a massa específica do fluido, t a variável tempo e u_i e x_j remetem às variáveis de velocidade u , v , e w e espaciais x , y e z , respectivamente.

Considerando um volume de controle infinitesimal, o acréscimo ou decréscimo temporal da massa específica neste volume é controlado pelo transporte convectivo de massa sobre as fronteiras deste volume de controle.

O termo temporal da equação da conservação da massa será desprezado, uma vez que as variações de massa específica nos escoamentos na atmosfera são muito pequenas. O termo gradiente vertical da massa específica será mantido, mesmo sabendo que esta sofre variações (ainda que pequenas) com a altura e principalmente com a temperatura, que são responsáveis pelo movimento de convecção natural causado por forças de empuxo. Logo, partindo da equação da continuidade, pode-se considerar:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \cong 0 \quad (3.2)$$

Com base na hipótese acima, a equação da continuidade pode ser resumida em:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (3.3)$$

De forma a obter a formulação média da equação (3.3) da continuidade, deriva-se a mesma introduzindo o conceito de médias temporais, resultando na seguinte relação:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_i}) = 0 \quad (3.4)$$

3.2.2. Transporte da Quantidade de Movimento

A equação de transporte da quantidade de movimento, pode ser formulada como segue:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i \cdot u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g + f_i \quad (3.5)$$

Os quatro termos do lado direito da equação (3.5) representam os x_i componentes das forças devido à pressão p , o tensor viscoso τ_{ij} , a força de empuxo ρg e as demais forças de campo f_i , respectivamente. Nos problemas de microescala meteorológica a força de coriolis, pode ser desprezada, já que o escoamento do ar nesta escala praticamente não é influenciado pela rotação da Terra (Seinfeld, 1986). Desta forma pode-se escrever o termo f_i :

$$f_i = -2\rho(\vec{\Omega} \times \vec{u}) = 0 \quad (3.6)$$

Neste trabalho, as forças de empuxo serão desprezadas. Sendo esta simplificação bastante razoável para as dispersões atmosféricas ocorridas na microescala. Desta forma, o termo ρg será desprezado. Com isso, a equação (3.5) será simplificada a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i \cdot u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.7)$$

Para um fluido newtoniano hipotético, o tensor tensão é dado por:

$$\tau_{ij} = -\mu_b \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.8)$$

em que $\mu_b = \frac{2}{3}\mu$ é a viscosidade *bulk*, μ é a viscosidade molecular e δ_{ij} representa o delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ para $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$).

Como as variações de massa específica nos escoamentos na atmosfera são muito pequenas, pela equação da continuidade (3.1) tem-se:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \cong 0 \quad (3.9)$$

Logo, o termo $-\mu_b \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}$ também será desprezado. Por fim:

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.10)$$

Aplicando a média temporal na equação (3.7):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_i \cdot u_j}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\tau_{ij}} + \overline{\rho u_i' \cdot u_j'}) \quad (3.11)$$

Quando se aplica a média na equação (3.7), nove termos surgem como resultado desta operação matemática. Fisicamente são nove tensores extras onde três destes são tensores normais e os seis demais são tensores de cisalhamento. Este tensor extra é conhecido como tensor tensão de Reynolds $\overline{\rho u_i' \cdot u_j'}$ e representa a tensão viscosa adicional devida a turbulência.

Como descrito anteriormente, o ar atmosférico foi considerado um fluido incompressível, onde sua massa específica não varia de acordo com o escoamento. Porém, para representar o gradiente vertical da massa específica do ar, em relação à altura (y), foi adotada uma relação linear encontrada em Ahrens (2005) e também utilizada em Pfluck (2010) na forma:

$$\rho_{ar\ atmosférico} = 1,2245 - 0,0001y \quad (3.12)$$

onde y representa a altura do domínio.

3.2.3. Conservação da Energia

A equação da conservação da energia escrita na forma da entalpia total H pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j H)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \tau_{ij} + Q_j) + \rho u_i f_i \quad (3.13)$$

O primeiro termo a direita da equação será considerado desprezível uma vez que uma das considerações do modelo é que o fluido é incompressível. O termo que representa a dissipação viscosa, $\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \tau_{ij})$, também será desprezível uma vez que sua contribuição é insignificante na atmosfera. O termo Q_j representa o fluxo de energia transferido por condução no volume de controle. O último termo, a direita da equação, refere-se ao trabalho realizado por forças de campo. Este último termo é negligenciado na derivação da equação da média da conservação da energia. Desta forma, tem-se:

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} = \frac{\partial(\rho u_j H)}{\partial x_j} - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (3.14)$$

onde H é a entalpia total, relacionado a entalpia estática $h(T,P)$ por:

$$H = h + \frac{1}{2} u_i u_j \quad (3.15)$$

Aplicando a média temporal na equação (3.13) tem-se:

$$\frac{\partial(\rho\bar{H})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\bar{u}_j\bar{H})}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{Q}_j + \overline{\rho u_j'' H''}) \quad (3.16)$$

onde a média e as flutuações da energia total, \bar{H} e H'' , são definidas como:

$$\bar{H} = \bar{h} + \frac{\overline{u_i u_i}}{2} + \frac{\overline{u_i'' u_i''}}{2} = \bar{h} + \frac{\overline{u_i u_i}}{2} + k \quad (3.17)$$

$$H'' = h'' + \bar{u}_i u_i'' + \frac{u_i'' u_i''}{2} - k \quad (3.18)$$

sendo k a energia cinética turbulenta definida por:

$$k = \frac{\overline{u_i'' u_i''}}{2} \quad (3.19)$$

3.2.4. Equação do Transporte de Poluentes

Na modelagem da conservação das espécies químicas, é calculada a fração de massa local para cada espécie, m_l , através da solução de uma equação de conservação para a espécie l . Assumindo o regime transiente, a equação de transporte das espécies químicas para o escoamento turbulento fica:

$$\frac{\partial(m_l)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i m_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial m_i}{\partial x_i} \right] + S \quad (3.20)$$

onde o número de Schmidt turbulento especificado é $Sc_t = 0,7$ (CFX[®], 2013). Sc representa o número de Schmidt representado pela expressão:

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (3.21)$$

Representando a razão entre a viscosidade cinemática e a difusividade mássica. μ e μ_t representam as viscosidades molecular e turbulenta, respectivamente. O termo S representa a fonte da espécie l .

3.3. Tratamento da Turbulência

O fenômeno de turbulência consiste de flutuações no campo de escoamento em relação a tempo e espaço. É um processo complexo, principalmente devido ser tridimensional, transiente e composto de muitas escalas. Este fenômeno ocorre quando as forças de inércia do fluido tornam-se significativas quando comparadas com as forças viscosas sendo caracterizado em altos números de Reynolds.

Turbulência é um dos mais complexos problemas na mecânica dos fluidos. Diferentes aproximações são usadas para o seu entendimento em problemas de engenharia. A maneira mais simples de reproduzi-lo é fazer com que a então chamada viscosidade turbulenta ou difusividade turbulenta seja como uma propriedade constante, a qual foi muito utilizada para predição de escoamentos em combustores. Por muitos anos, o método integral baseado em velocidade empírica e perfis de temperatura foi adaptado em escoamentos tipo jato.

Obviamente, um tratamento mais rigoroso é necessário para prever escoamentos turbulentos complexos na engenharia, tais como escoamentos tridimensionais recirculantes ou giratórios (*swirling*) onde a viscosidade turbulenta não é constante.

A aproximação fundamental para estudos de turbulência é conhecida por *Direct Numerical Simulation* (DNS) que consiste em resolver as equações de Navier-Stokes com tamanho de malha de origem de grandeza das escalas de Kolmogorov sem usar nenhum modelo de turbulência. Entretanto, o DNS necessita de uma considerável capacidade computacional que ainda é impraticável em problemas práticos de engenharia. Uma alternativa é o *Large-Eddy Simulation* (LES), que resolve as equações em tamanho de grade dos grandes turbilhões, mas ainda necessita modelar as pequenas escalas de turbulência. Atualmente, com a utilização de processamento paralelo (*Parallel Virtual Machine* - PVM) o LES vem sendo amplamente utilizado em problemas de engenharia.

Para a maioria dos problemas práticos de engenharia, no entanto, não é necessário resolver os detalhes das flutuações turbulentas para se representar um escoamento, sendo somente necessário os efeitos da turbulência no escoamento médio. Para tal, utilizam-se os modelos de turbulência estatísticos baseados nas equações da média temporal de Reynolds.

Os modelos de turbulência, em bases estatísticas, modificam a equação de Navier-Stokes pela introdução da média temporal (*Reynolds Averaging*) produzindo as equações de Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS).

Simulações empregando os modelos de turbulência estatísticos além de serem representativos dos problemas encontrados na engenharia, reduzem enormemente o esforço computacional quando comparado ao DNS. No entanto, a RANS introduz termos desconhecidos que contém produto de quantidades flutuantes que agem como tensores adicionais ao fluido. Estes termos são chamados de tensores de Reynolds.

Os tensores de Reynolds precisam ser modelados pela adição de uma equação adicional de quantidade conhecida para obter o fechamento do problema, ou seja, ter um número suficiente de equações para que o problema seja possível de ser resolvido. Esta equação adicional necessária para “fechar” o problema é quem define o tipo de modelo de turbulência (CFX[®], 2013).

3.3.1. Modelo de Turbulência $k-\varepsilon$

O modelo $k-\varepsilon$ padrão (Launder e Spalding, 1974) baseado na hipótese de Boussinesq, que também é conhecido como modelo de dissipação viscosa (*Eddy Viscosity Models*), apresenta comportamento isotrópico dos tensores de Reynolds. Este foi o modelo escolhido para reproduzir os efeitos da turbulência no modelo neste trabalho. Este modelo sugere que a turbulência consiste de pequenos turbilhões que são continuamente formados e dissipados, e na qual os tensores de Reynolds são assumidos serem proporcionais à média dos gradientes de velocidade.

Modelos que utilizam a suposição da viscosidade dissipativa relacionam os tensores de Reynolds e os fluxos turbulentos (fluxos de Reynolds) às variáveis médias do escoamento. Estes modelos usam a hipótese do gradiente difusivo para relacionar os

tensores de Reynolds aos gradientes da velocidade média e a viscosidade turbulenta, conforme mostra a equação (3.22):

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_j} \right) \quad (3.22)$$

O fluxo de energia turbulento por sua vez, é modelado usando a suposição da difusividade dissipativa que pode ser expresso através da equação (3.23):

$$-\overline{\rho u_j'' h''} = \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_j} \quad (3.23)$$

onde o Pr_t é o número de Prandtl e μ_t , a viscosidade turbulenta.

As flutuações dos termos do trabalho viscoso, para turbulência isotrópica homogênea, são aproximadas pela equação (3.24):

$$\frac{\partial (\overline{u_i'' \tau_{ij}})}{\partial x_j} \approx \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) \quad (3.24)$$

As Equações (3.22), (3.23) e (3.24) somente poderão expressar os termos das flutuações turbulentas das variáveis médias se a energia cinética turbulenta, k e viscosidade turbulenta, μ_t , forem conhecidas. O modelo de turbulência k - ϵ é capaz de fornecer estas variáveis através da solução de duas equações de transporte, sendo uma para k e outra para ϵ , para posteriormente calcular a viscosidade turbulenta. A primeira derivação para este modelo foi para escoamentos incompressíveis, nos quais as flutuações de massa específica podem ser ignoradas. A mesma formulação é utilizada para escoamentos compressíveis, com a exceção de um termo que possui formulação distinta para este tipo de escoamento. A viscosidade turbulenta, μ_t , é modelada como o produto de uma escala turbulenta de velocidade, V_t , e um comprimento de escala turbulenta, l_t , conforme proposto por Prandtl e Kolmogorov. Introduzindo uma constante de proporcionalidade, chega-se a equação (3.25):

$$\mu_t = \rho c_\mu l_t V_t \quad (3.25)$$

A escala de velocidade turbulenta é igual a raiz quadrada da energia cinética turbulenta, k , sendo que esta é determinada via equação de transporte adicional que será apresentada posteriormente:

$$V_t = \sqrt{k} \quad (3.26)$$

No modelo de duas equações k - ε assume-se que o comprimento de escala é um comprimento de escala de dissipação e quando as escalas dissipativas turbulentas são isotrópicas, Kolmogorov determinou que:

$$\varepsilon = \frac{k^{\frac{2}{3}}}{l_t} \quad (3.27)$$

na qual ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta de energia cinética. Caso k , e l_t sejam conhecidos, a viscosidade turbulenta é determinada a partir da equação (3.25) e os tensores de Reynolds podem ser calculados a partir da equação (3.22), fechando assim as equações turbulentas do transporte de movimento. A tarefa restante é determinar equações para k , ε e condições de contorno apropriadas.

Portanto, a viscosidade turbulenta, μ_t , é calculada a partir do produto de uma escala turbulenta de velocidade e um comprimento de escala turbulenta, como segue:

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.28)$$

em que ε é a taxa de dissipação de k (o montante de k por massa e tempo convertidos em energia interna de fluido por ação viscosa) e c_μ é uma constante do modelo.

Esta é conhecida como a relação de Komogorov-Prandlt. Os coeficientes de transporte (difusivo) turbulento das equações da energia e da concentração são da mesma ordem de grandeza da viscosidade turbulenta μ_t e relacionam-se com esta por:

$$\frac{k_t}{C_p} = \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (3.29)$$

$$\bar{\rho} D_t = \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (3.30)$$

onde Pr_t e Sc_t são respectivamente o número de Prandtl e o número de Schmidt turbulentos. Trata-se, na verdade, de constantes do modelo que são ajustadas a partir da comparação de resultados numéricos com dados experimentais (Boçon, 1998).

Finalmente, apresentam-se as equações de transporte (3.31) e (3.32) deste modelo para a obtenção local dos valores de k e ε :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k + \rho \varepsilon \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k + \rho C_{\varepsilon 2} \varepsilon) \quad (3.32)$$

Em que os coeficientes difusivos são dados por:

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\rho_k} \quad (3.33)$$

$$\Gamma_\varepsilon = \mu + \frac{\mu_t}{\rho_\varepsilon} \quad (3.34)$$

A taxa de produção da energia cinética turbulenta P_k é dada por:

$$P_k = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} \quad (3.35)$$

Substituindo o tensor de Reynolds da equação (3.22), na equação (3.35) tem-se:

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.36)$$

As constantes existentes no equacionamento do modelo $k-\varepsilon$ estão listadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 - Constantes do Modelo $k-\varepsilon$ Padrão

| C_μ | $C_{\varepsilon 1}$ | $C_{\varepsilon 2}$ | σ_k | σ_ε | Pr_t |
|---------|---------------------|---------------------|------------|----------------------|--------|
| 0.09 | 1.44 | 1.92 | 1.0 | 1.3 | 0.9 |

3.3.2. Escoamento Próximo à Parede

Perto de uma parede sem deslizamento, há fortes gradientes nas variáveis dependentes. Além disso, os efeitos viscosos sobre os processos de transporte são grandes. A representação destes processos dentro de uma simulação numérica levanta o problema de explicar os efeitos viscosos na parede, bem como de resolver a variação rápida de variáveis de fluxo que ocorre dentro da região da camada limite.

Experimentos e análise matemática têm demonstrado que a região próxima da parede pode ser subdividida em duas camadas. A camada mais interna, chamada subcamada viscosa, onde fluxo é quase laminar, e a viscosidade molecular desempenha um papel dominante na dinâmica e transferência de calor. Mais longe da parede a turbulência domina o processo de mistura. Finalmente, existe uma região entre a camada turbulenta e a subcamada viscosa chamada camada logarítmica chamada tampão, onde os efeitos da viscosidade molecular e turbulência são de igual importância. A Figura 3.1 ilustra essas subdivisões da zona próxima da parede (CFX[®], 2013).

Assumindo que o perfil logarítmico se aproxima razoavelmente da distribuição de velocidade próxima à parede, ele fornece um meio para calcular numericamente a tensão de cisalhamento do fluido como uma função da velocidade a uma determinada distância da parede. Isto é conhecido como uma "função de parede" e a natureza logarítmica dá origem à conhecida "lei de registro da parede".

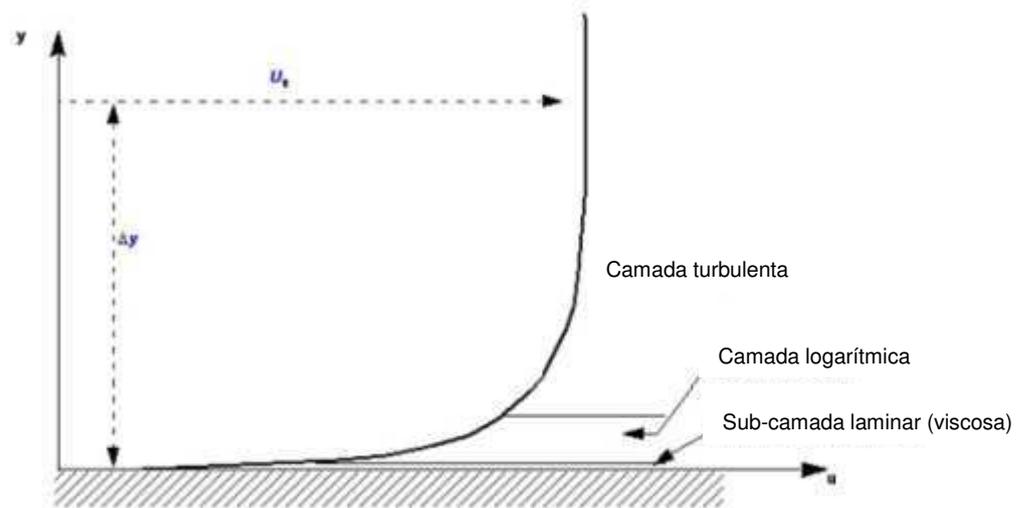


Figura 3.1 – Subdivisão da região próxima à parede (CFX[®], 2013)

Duas abordagens são comumente usadas para modelar o fluxo na região de parede próxima:

- 1) O método de função de parede utiliza fórmulas empíricas que impõem condições adequadas perto da parede sem resolver a camada limite, economizando recursos computacionais. Todos os modelos de turbulência no CFX[®] são adequados para um método de função de parede. As principais vantagens da abordagem de função de parede é que as camadas de cisalhamento de alto gradiente perto de paredes podem ser modeladas com malhas relativamente grossas, proporcionando economias substanciais no tempo de CPU e armazenamento. Também evita a necessidade de ter em conta os efeitos viscosos no modelo de turbulência.
- 2) O método de “baixo número de Reynolds” (LRN) resolve os detalhes do perfil da camada limite usando escalas de tamanho de malha muito pequenas na direção normal à parede. O método de baixo Reynolds não se refere ao número de Reynolds do dispositivo, mas ao número turbulento de Reynolds, que é baixo na subcamada viscosa. Este método pode portanto ser utilizado mesmo em simulações com números de Reynolds muito elevados, desde que a subcamada viscosa tenha sido resolvida.

3.3.2.1. O Tratamento da Velocidade Próxima a Parede

Para equacionar o problema com a possibilidade de velocidades próximas de zero nas proximidades da parede, algumas funções empíricas foram desenvolvidas com esse objetivo. A função “parede” utilizada no CFX[®] é uma extensão do método de Launder e Spalding (1974). Nesta abordagem a velocidade tangencial próxima a parede é relacionada com a tensão de cisalhamento, τ_∞ , através de uma relação logarítmica. A relação logarítmica para a velocidade próxima à parede é dada por:

$$u^+ = \frac{U_t}{u_*} = \frac{1}{k} \ln(y^+) + C \quad (3.37)$$

onde:

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y u_*}{\mu} \quad (3.38)$$

$$u_* = \left(\frac{\tau_\infty}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.39)$$

onde u^+ é a velocidade próxima à parede, u_* a velocidade de fricção, U_t é a velocidade tangente à parede à uma distância Δy da mesma (relacionada com a distância estabelecida entre o primeiro nó e a parede), y^+ é a distância adimensional da parede, τ_∞ é a tensão de cisalhamento na parede, k é a constante de von Kármán e C é uma constante relacionada a rugosidade da parede (CFX[®], 2013).

Esta relação apresenta a propriedade de não tender a zero quando U_t tende a zero, já que em um fluxo turbulento o valor de k nunca é completamente zero. Baseado nesta definição, a seguinte expressão para U_* pode ser obtida:

$$U_* = \frac{U_t}{\frac{1}{k} \ln(y^*) + C} \quad (3.40)$$

O valor absoluto da tensão de cisalhamento, τ_∞ , é então obtido:

$$\tau_\infty = \rho u_* U_* \quad (3.41)$$

onde:

$$y^* = \frac{(\rho u_* \Delta y)}{\mu} \quad (3.42)$$

O tratamento matemático descrito acima é apropriado apenas quando as paredes consideradas hidraulicamente “lisas”, sem rugosidades. Para paredes rugosas, o perfil logarítmico ainda existe, mas desloca-se para uma região mais próxima da parede. O efeito da rugosidade é considerado modificando-se a expressão (3.37) para:

$$u^+ = \frac{1}{k} \ln \left(\frac{y^*}{1+0,3k^+} \right) + C \quad (3.43)$$

onde k^+ apresenta a forma de:

$$k^+ = y_R \frac{\rho}{\mu} u_* \quad (3.44)$$

Sendo y_R a “rugosidade equivalente de grão de areia”. Segundo Blocken et al. (2007), a relação entre a “rugosidade equivalente de grão de areia” e a rugosidade aerodinâmica (y_0), em simulações de escoamento atmosféricos como software CFX[®], é descrita através da expressão:

$$y_R = 29,6y_0 \quad (3.45)$$

3.3.2.2. O Tratamento da Viscosidade Turbulenta Próxima a Parede

Um modelo definido como alto número de Reynolds (HRN) não pode, em geral, ser integrado em todo o domínio do fluxo para um fluxo turbulento limitado a regiões de parede. Isto é particularmente verdadeiro quando aplicado a fluxos que determinam dispersões atmosféricas em ambientes abertos. Um fluxo na atmosfera pode normalmente ser caracterizado por baixo número de Reynolds (LRN) não só em regiões de quase parede,

mas também em regiões distantes das paredes. Em regiões de quase parede, Shish e Lumley (1993) mostraram que todos os enormes vórtices de energia se reduzem a vórtices dissipativos de Kolmogorov e, conseqüentemente, todas as propriedades de fluxo próximo da parede, tais como a velocidade de fricção e a taxa de deformação média, são caracterizadas por microescalas de Kolmogorov. Modificações no termo viscoso aplicados a modelos de alto número de Reynolds (HRN) são, portanto, necessárias para fazer com que os modelos tenham uma resposta adequada aos fluxos nos quais o efeito da viscosidade molecular se torna comparável ao da viscosidade turbulenta. No entanto, quando usados em conjunto com funções de parede, os modelos de HRN alcançaram um sucesso notável em problemas de fluxo de engenharia. Sem integrar o modelo até a região da superfície da parede, o método da função da parede ajuda a ajustar a região do núcleo do fluxo a região da parede. A origem da função da parede está relacionada com o equilíbrio local e a suposição uniforme da tensão de cisalhamento e a chamada lei-da parede. Como conseqüência, seu uso para fluxos complexos torna-se fisicamente questionável, por exemplo: fluxos com separação ou quando a solução do domínio interessada ocorre exatamente na região da parede. O perfil de velocidade da parede próxima em um domínio, com uma taxa de fluxo de ar de baixa vazão, difere da lei log-convencional da parede. Isto fornece evidências de que o uso desta abordagem pode ser inapropriado em camadas fronteira turbulentas a números de Reynolds baixos.

Incorporando as funções de parede em condições de contorno em simulações numéricas, as desvantagens associadas a abordagem darão expressões incorretas no ponto de grade de parede próxima onde as funções de parede são usadas. Conseqüentemente, a previsão para todo o domínio do fluxo pode estar contaminada. Vários aspectos da invalidez da abordagem das funções de parede foram abordados brevemente ou em detalhes em trabalhos anteriores de Patel et al. (1984), Chen e Patel (1988), So et al. (1991).

Para encontrar alternativas pelas quais as desvantagens de usar o método de função de parede podem ser eliminadas, diferentes abordagens de modelagem foram desenvolvidas para explicar os comportamentos de turbulência na proximidade da parede. Esses modelos podem ser diretamente integrados na superfície da parede e são capazes de simular efeitos viscosos de quase-parede. Algumas abordagens clássicas de modelagem de proximidade de parede incluem, por exemplo: formulações de viscosidade turbulenta anisotrópicas (Speziale e Abid, 1995); Introdução de uma equação de transporte adicional no fecho de duas equações e utilizando esta quantidade de transporte

para reformular a viscosidade turbulenta (Durbin, 1991); Ou implemento de um modelo de duas camadas (Launder, 1986) e (Chen e Patel, 1988). A abordagem mais popular atualmente é modificar os coeficientes em modelos de alto Reynolds por meio da formulação de baixo Reynolds (LRN), como por exemplo: deinição de funções de amortecimento, de modo que os efeitos viscosos podem ser adequadamente refletidos nas equações de transporte turbulento como sendo integrados em direção a uma parede (Mathur, 2013), (Wray e Agarwal, 2015) e (Zhang et al., 2016).

O objetivo principal na formulação de HRN para um modelo de LRN é conceber funções de amortecimento adequadas para remodelar vários termos nas equações de transporte turbulento de modo que eles sejam capazes de responder razoavelmente em física às propriedades de turbulência na parede próxima. O princípio básico na formulação de um modelo LRN é reduzir a viscosidade turbulenta próximo da parede de uma maneira apropriada de modo a tornar os efeitos viscosos cada vez mais dominantes sobre, ou comparáveis, à viscosidade turbulenta. Isto pode ser conseguido através de ajustamentos na energia cinética turbulenta perto da parede e na taxa de dissipação, por exemplo: amortecimento ou reforço da respectiva produção e dissipação ou destruição. Os termos acessíveis são frequentemente os termos de produção e destruição em equações de transporte turbulento.

Para reduzir a viscosidade turbulenta próxima a parede, usualmente é aplicada uma função denominada função amortecimento (f_μ) (Peng, 1998).

Para equacionar o problema da viscosidade turbulenta em fluxos próximo a paredes, alguns autores já propuseram funções amortecedoras empíricas para o cálculo da viscosidade turbulenta. Entre os trabalhos mais conhecidos podemos citar o modelo de Yang-Shih (1993), onde:

$$\mu_t = C_\mu f_\mu k T_t \quad (3.46)$$

onde:

$$f_\mu = \left[\left(1 - \exp(-1.5 \times 10^{-4} R_y - 5 \times 10^{-7} R_y^3 - 1 \times 10^{-10} R_y^5) \right)^{0.5} \right] \quad (3.47)$$

e

$$T_t = \frac{k}{\varepsilon} + \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \quad (3.48)$$

$$R_y = \frac{\sqrt{ky}}{\nu} \quad (3.49)$$

E as equações proposta por Abe-Kondoh-Nagano (1994):

$$\mu_t = C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.50)$$

$$f_t = \left[\left(1 - \exp\left(\frac{-y^*}{14}\right) \right) \right] \left[1 + \frac{5}{R_t^{3/4}} \exp\left\{ -\left(\frac{R_t}{2000}\right)^2 \right\} \right] \quad (3.51)$$

$$y^* = \frac{U_\varepsilon y}{\nu} \quad (3.52)$$

No presente trabalho o autor propõe a utilização de equações empíricas para a correção da viscosidade turbulenta, tomando como referência a teoria da mistura de Prandtl, onde a viscosidade é calculada através de uma velocidade e de um comprimento característico:

$$\mu_t \approx \hat{V} \times lm \quad (3.53)$$

onde \hat{V} é a velocidade e lm o comprimento característico.

Para escoamentos mais simples, do tipo camada de mistura, jatos e esteiras, considera-se que o cisalhamento médio transversal ao escoamento é predominante sobre o cisalhamento médio em relação às outras direções. Logo:

$$\hat{V} = lm \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right| \quad (3.54)$$

Esta é a chamada hipótese de Prandtl, uma das primeiras tentativas de se calcular a viscosidade turbulenta. Tomando como exemplo uma camada de mistura em desenvolvimento espacial ilustrada na Figura 3.2, pode-se estimar o comprimento de mistura de Prandtl.

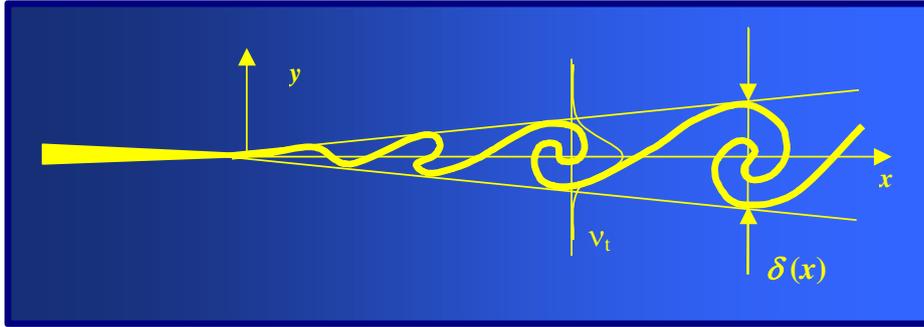


Figura 3.2 – Desenvolvimento espacial do comprimento de Prandtl. (Rosa, 2003)

Analisando a Figura 3.2 observa-se que este tipo de escoamento apresenta um comportamento bem determinado em termos do alargamento criado pela dinâmica das estruturas coerentes. O comprimento característico deste escoamento é a espessura da camada de mistura. Logo:

$$lm \approx \delta(x) \rightarrow lm = C\delta(x) \quad (3.55)$$

A constante C é empírica e diferente para cada tipo de escoamento considerado, em função da sua natureza física. A partir da equação (3.55) observa-se que a viscosidade turbulenta passa a depender de x e de y , como mostra a equação final (eq. 3.56). A função é empírica, deduzida a partir de experimentos, para todos os tipos de escoamentos apresentados.

$$\mu_t(\vec{x}) = lm^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \quad (3.56)$$

Com base nesta referência então, o autor propôs equações empíricas, para funções amortecimentos, tomando a velocidade e o comprimento do domínio como únicas variáveis. Vale lembrar que a equação de Prandtl é conhecido também como “modelo a zero equação”, diferente do modelo de duas equações utilizado neste trabalho (k - ϵ padrão). Assim, é importante registrar que a dedução a cima, da viscosidade turbulenta de Prandtl, foi detalhada apenas para demonstrar a origem da fundamentação da proposta do autor. Desta forma, foi proposta a seguinte equação para o cálculo da viscosidade turbulenta neste trabalho:

$$\mu_t = C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.57)$$

sendo:

$$f_{\mu} = \exp(n \times z) \times u_{ref} \quad (3.58)$$

onde n variou de 0,0010 a 0,0025 conforme grau de convecção do experimento. Z representa a distância na direção longitudinal do lançamento da emissão e u_{ref} a velocidade de referência medida a 10m de altura.

4. MÉTODO NUMÉRICO

Soluções analíticas, para as equações de Navier Stokes, existem somente para escoamentos simples sob condições ideais. Para escoamentos reais, um tratamento numérico deve ser adotado, para que as equações diferenciais sejam resolvidas com a utilização de um método de aproximação. Desta forma, os termos não-lineares das equações diferenciais são substituídos por termos algébricos, que posteriormente serão resolvidos por um método numérico.

As complexas formulações de Navier-Stokes aplicadas para a hipótese de um meio contínuo, apresentadas inicialmente por Navier em 1822 (Bird, 1960), constituíram-se no ponto de partida do desenvolvimento e aperfeiçoamento de diversas técnicas de solução aplicadas à engenharia. Paralelamente às analíticas, as técnicas numéricas obtiveram um impulso extraordinário com o aumento do desempenho do processamento computacional, tanto em nível de hardware como de software. Os métodos numéricos das diferenças finitas e, mais recentemente o dos volumes finitos, o qual está sendo empregado neste trabalho, adaptaram-se facilmente aos princípios lógicos do tratamento dos dados computacionalmente. Ambos os métodos compreendem alguns procedimentos básicos comuns e que serão discutidos especificamente para o método dos volumes finitos.

Este capítulo descreve o método aplicado, utilizando o software CFX[®], para a resolução do sistema de equações diferenciais, bem como suas principais ferramentas auxiliares.

4.1. Discretização das Equações Governantes

A metodologia aplicada envolve a discretização do domínio de solução tridimensional em vários volumes de controle, utilizando-se uma malha computacional. Através da técnica dos volumes finitos (também denominado como métodos dos volumes de controle) é possível integrar todas as equações governantes sobre um volume de controle fixo no espaço. Desta forma, as equações governantes do problema serão integradas sobre cada um dos volumes de controle, sendo que todas as variáveis relevantes (massa, energia, etc.) são conservadas dentro de cada um dos volumes de controle. A Figura 4.1 ilustra um típico volume de controle (tetraédrico), onde a superfície

do volume de controle é representada pela área hachurada. Observa-se que cada um dos nós do elemento é conectado por um jogo de superfícies que definem o volume de controle. Todas as soluções das variáveis em questão e propriedades dos fluidos utilizados são armazenadas nos nós do elemento. Assim, as equações governantes são integradas sobre o volume de controle, utilizando-se o Teorema da Divergência de Gauss para converter algumas integrais volumétricas (que representam fontes ou termos de acúmulos) em integrais de superfície (que representam somatórios de fluxos). Com isso, obtém-se para as equações de conservação de massa, movimento e energia, já modeladas com as considerações feitas no capítulo 3:

$$\int_S (\rho u_i) dn_i = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho u_i dv + \int_S \rho u_i u_j dn_j = - \int_S P dn_j + \int_S \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) dn_j \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho H dv + \int_S \rho u_j H dn_j = \int_S Q_j dn_j \quad (4.3)$$

O primeiro passo para a solução numérica do sistema de equações diferenciais é a criação de um sistema acoplado de equações algébricas, obtido através da linearização do antigo sistema de equações. Isto é feito convertendo cada termo em sua forma discreta. Os termos volumétricos (termos de fonte ou de acúmulo) são convertidos em sua forma discreta pela aproximação de valores específicos em cada setor, e depois integrados sobre todos os setores que formam o volume de controle. Os somatórios de fluxos são convertidos em sua forma discreta pela aproximação dos fluxos nos pontos de integração, ipn , que se encontram localizados no centro de cada segmento de superfície de um elemento hipotético que circunda o volume de controle (Figura 4.2).

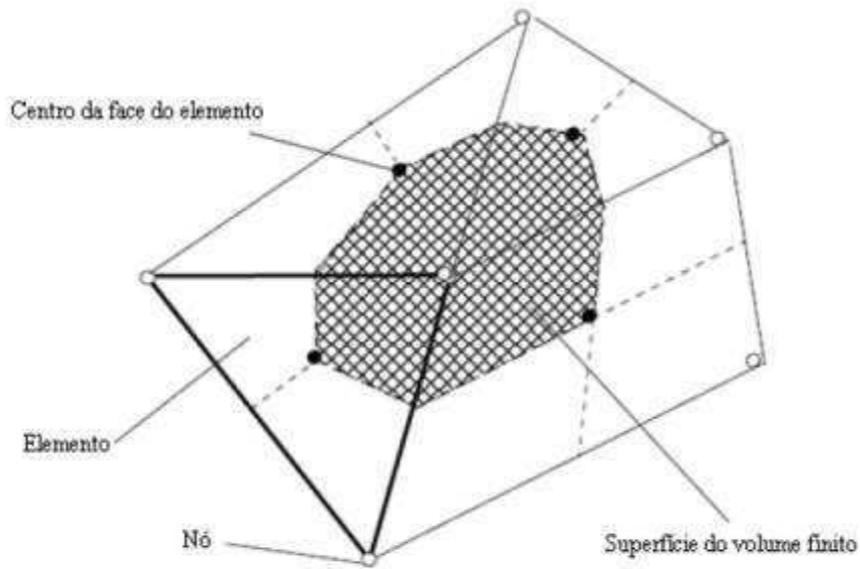


Figura 4.1 – Esquema de um volume de controle (tetraédrico). Adaptado (CFX[®], 2013)

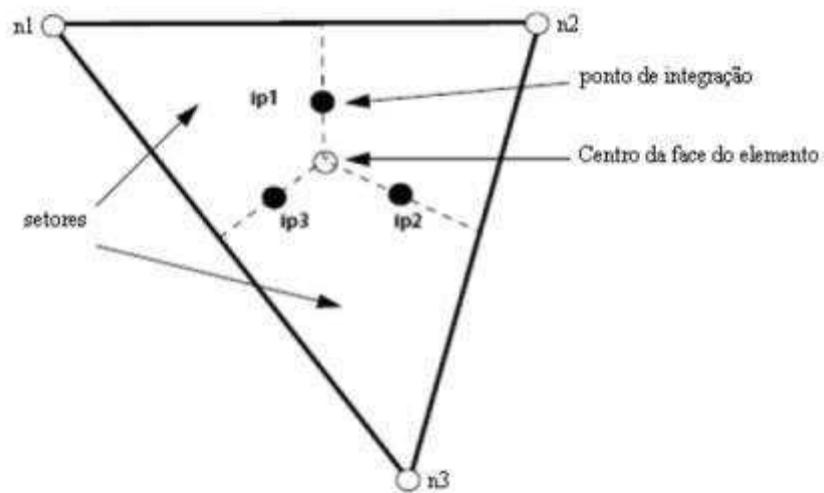


Figura 4.2 – Volume de controle e pontos de integração (ipn). Adaptado (CFX[®], 2013)

Dessa forma, os termos discretos são obtidos através da integração dos fluxos sobre os segmentos de superfície que formam o volume de controle.

4.2.O Acoplamento Pressão – Velocidade

No processo de solução sequencial utilizado, uma equação descrevendo a atualização da pressão é necessária, e não está explicitamente disponível através do balanço de massa ou de conservação da quantidade de movimento. A família de

algoritmos SIMPLE (Patankar, 1980) é baseada na utilização entre correções de velocidade e pressão de forma a reorganizar a equação de continuidade em termos de um cálculo de correção de pressão. No software CFX[®], uma estratégia similar é adotada, considerando as alterações propostas por Rie e Chow (1983) para discretização dos fluxos de massa, evitando o desacoplamento e as modificações de Majumdar (1988) para remover a dependência da solução em estado estacionário em relação aos passos de tempo.

4.3. Funções de Forma

Durante o processo de solução do problema, os valores obtidos são mantidos nos nós de cada um dos elementos discretos da malha computacional. No entanto, estes valores devem ser aproximados nos pontos de integração. As funções de forma são usadas para obter as soluções dos problemas, e conseqüentemente sua variação, em relação aos elementos. A variável ϕ varia com relação a um elemento de controle da seguinte forma:

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_{\text{nós}}} N_i \phi_i \quad (4.4)$$

onde N_i representa a função de forma para o nó i e ϕ o valor de ϕ no nó i , considerando o somatório sobre todos os nós de um elemento. As propriedades de uma função de forma incluem:

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{nós}}} N_i \phi_i = 1 \quad (4.5)$$

$$\text{No nó } j, N_i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (4.6)$$

As funções de forma são lineares em termos de coordenadas paramétricas e são utilizadas para calcular inúmeras variáveis geométricas. Como exemplo, a Figura 4.3 e a Equação (4.4) ilustram as funções de forma para um elemento hexaédrico:

$$N_1(s, t, u) = (1 - s)(1 - t)(1 - u)$$

$$N_2(s, t, u) = s(1 - t)(1 - u)$$

$$N_3(s, t, u) = st(1 - u)$$

$$N_4(s,t,u) = (1-s)(1-u) \quad (4.7)$$

$$N_5(s,t,u) = (1-s)(1-t)u$$

$$N_6(s,t,u) = s(1-t)u$$

$$N_7(s,t,u) = stu$$

$$N_8(s,t,u) = (1-s)tu$$

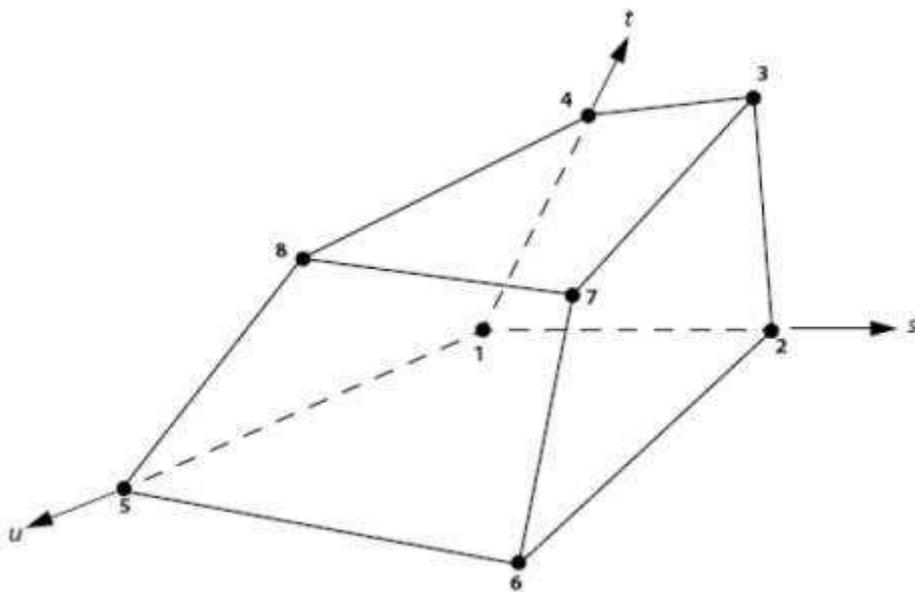


Figura 4.3 – Representação esquemática de um elemento hexaédrico. Adaptado (CFX[®], 2013)

Uma das principais aplicações das funções de forma é desenvolver as derivadas espaciais para todos os termos de difusão (CFX[®], 2013). Como exemplo, a derivada na direção x , no ponto de integração ip é dada por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{ip} = \sum_n \frac{\partial N_n}{\partial x} \Big|_{ip} \phi_n \quad (4.8)$$

4.4. Discretização dos Termos de Advecção e Transientes

Para realizar a discretização do termo de advecção, a variável ϕ_{up} deve ser aproximada em termos dos valores nodais de ϕ_{ip} . O esquema de advecção implementado no software CFX[®], e utilizado neste trabalho, chamado de “*High Resolution Scheme*” (“esquema de alta resolução” em uma tradução livre) pode ser descrito da seguinte forma:

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \beta \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r} \quad (4.9)$$

onde ϕ_{up} representa o valor no nó antecessor e \vec{r} é o vetor originado entre o nó antecessor e o ip ponto de integração. Nesta técnica, o valor β é determinado como o valor mais próximo de 1 possível, variando entre 0 e 1, sem que sejam introduzidas oscilações na solução do problema; enquanto $\nabla \phi$ é igual ao gradiente apresentado no nó antecessor.

Em relação aos termos transientes, a fórmula geral para a discretização do mesmo n -ésimo passo de tempo é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV \cong V \frac{(\rho \phi)^{n+\frac{1}{2}} - (\rho \phi)^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} \quad (4.10)$$

onde os valores no início do passo de tempo são identificados pelos sobrescritos $n+0$ e $n-0$, respectivamente. De acordo com o *High Resolution Scheme*, (com β próximo de 1) os valores para início e fim do passo de tempo são aproximados pelas expressões:

$$(\rho \phi)^{n-\frac{1}{2}} = (\rho \phi)^0 + \frac{1}{2} ((\rho \phi)^0 - (\rho \phi)^{00}) \quad (4.11)$$

$$(\rho \phi)^{n+\frac{1}{2}} = (\rho \phi) + \frac{1}{2} ((\rho \phi) - (\rho \phi)^0) \quad (4.12)$$

Quando estas expressões são substituídas na equação 4.7, a expressão resultante obtida é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV \cong V \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{3}{2} (\rho \phi) - 2(\rho \phi)^0 + \frac{1}{2} (\rho \phi)^{00} \right) \quad (4.13)$$

4.5. Estratégia de Solução – O Solver Acoplado

Solvers que não apresentam acoplamento, também chamados de *solvers* segregados, utilizam uma estratégia de solução onde as equações de momentum são resolvidas inicialmente, utilizando um valor estimado para a variável pressão, obtendo assim uma equação de correção da pressão. Devido a natureza desse sistema de equações, um grande número de iterações é necessário. O solver acoplado, utilizado pelo software CFX[®] resolve o sistema de equações (u, v, w, p) com um sistema singular. Esta técnica usa um sistema de equações discretizado totalmente implícito, a cada passo de tempo, reduzindo o número necessário de iterações para a convergência do sistema. A Figura 4.4 ilustra o processo em questão. Para o escoamento de um fluido homogêneo, o processo iterativo acontece de acordo com os seguintes passos:

- 1) Inicialização do processo, com a identificação do domínio e do passo de tempo;
- 2) Solução do sistema de equações formado pelas formas discretizadas do balanço de quantidades de movimento, energia e da correção de pressão;
- 3) Solução das equações referentes às variáveis adicionais do sistema;
- 4) Solução das equações do modelo de turbulência escolhido;
- 5) Atualização das propriedades dos fluidos;
- 6) Verificação do critério de convergência
- 7) Avanço no passo de tempo ou finalização da simulação, caso o critério seja atingido, ou início de uma nova iteração.

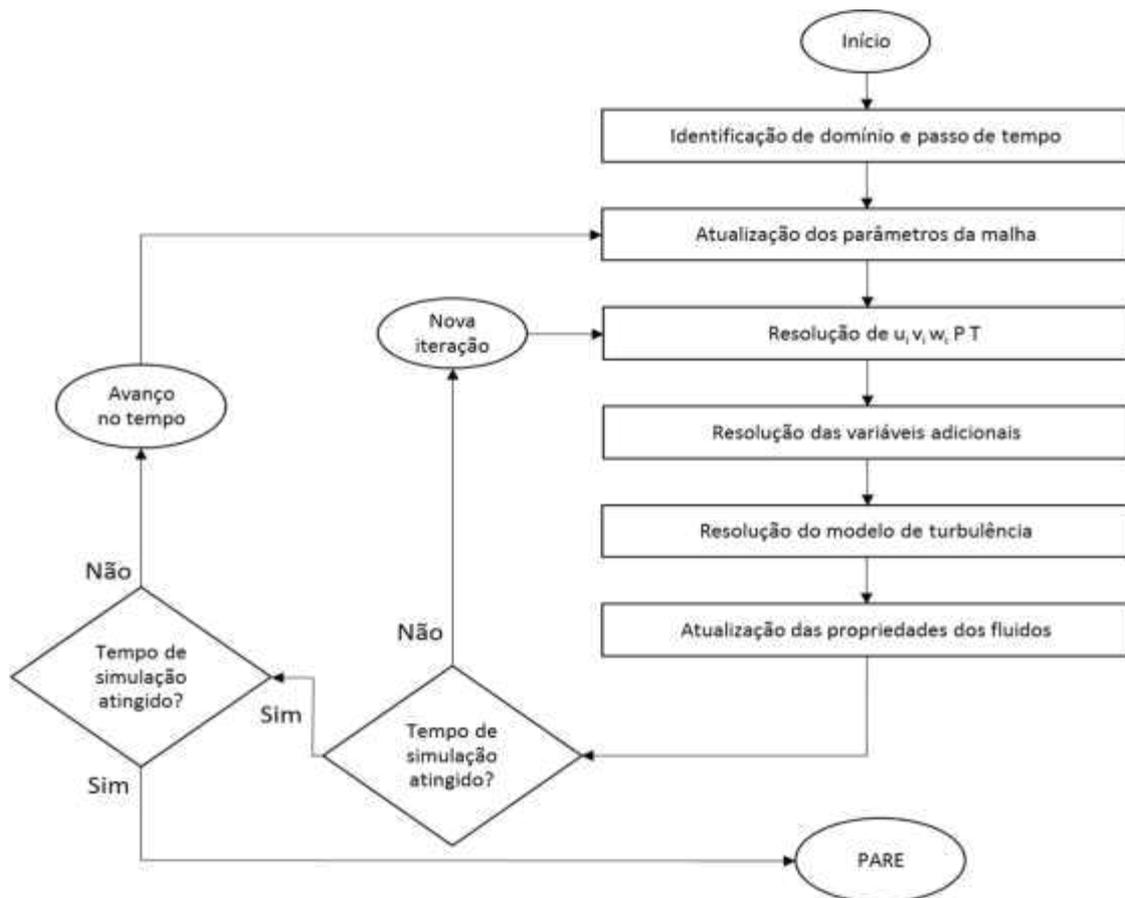


Figura 4.4 – Estratégia de solução do sistema de equações discretizadas. Adaptado (CFX®, 2013)

4.6. Critério de Convergência

A convergência da solução, onde o método numérico iterativo é aplicado, é atingida quando as mudanças que ocorrem de uma iteração para outra nas variáveis do problema (ou em parâmetros de interesse envolvendo essas variáveis) são suficientemente pequenas a ponto de se poder considerar que a solução não sofre mais mudança. O critério de convergência utilizado nas simulações deste trabalho foi o “RMS *residual*”. A sigla RMS significa *Root Mean Square* (“média da raiz quadrada” em uma tradução livre). Este critério é obtido considerando todos os resíduos ao longo do domínio computacional, elevando-se ao quadrado, obtendo a média aritmética de todos os valores e obtendo a raiz quadrada. Essa metodologia é aplicada para todas as equações contidas no sistema e todas as variáveis. O valor escolhido como limite máximo foi de $1,0 \times 10^{-4}$ para todas as equações de transporte envolvidas no problema (massa, movimento e calor).

5. AVALIAÇÃO DE PERFORMANCE DO MODELO

Neste capítulo será apresentado o resultado da avaliação de performance do modelo, tomando como referência o experimento de Copenhagen. Com isso, os resultados teóricos do modelo serão comparados com os resultados de campo para avaliação da eficiência da descrição do fenômeno real. Além disso, a avaliação também constará da comparação dos índices estatísticos do modelo com outros modelos encontrados na literatura que simularam o mesmo experimento de campo (Copenhagen).

5.1. O Experimento de Copenhagen

Para validação do modelo matemático proposto, serão utilizados como referência os dados obtidos durante o experimento de Copenhagen na Dinamarca nos anos de 1977 e 1978. Os dados deste experimento são utilizados amplamente no meio acadêmico quando o assunto é modelagem de dispersão atmosférica (Tabela 5.1). Devido à vasta quantidade de informações meteorológicas coletadas durante o experimento, é possível repetir as condições em rotinas matemáticas atuais, simulando diversas condições de estabilidades atmosféricas (Tabela 5.2).

O experimento de Copenhagen consistiu na liberação (sem empuxo) de um gás traçador, hexafluoreto de enxofre (SF_6), de uma torre de transmissão de TV a uma altura de 115 metros em relação ao solo e coletado em unidades de amostragem localizadas em três linhas distintas, com uma cota de 2 a 3 metros acima do solo. As liberações foram realizadas durante 9 dias, totalizando 9 conjuntos de amostras, coletadas a partir de amostradores posicionados a uma distância de 2 a 6 km (Figura 5.1), em relação ao ponto de liberação do poluente, onde o terreno foi classificado como residencial, com um comprimento de rugosidade de 0,6 m.

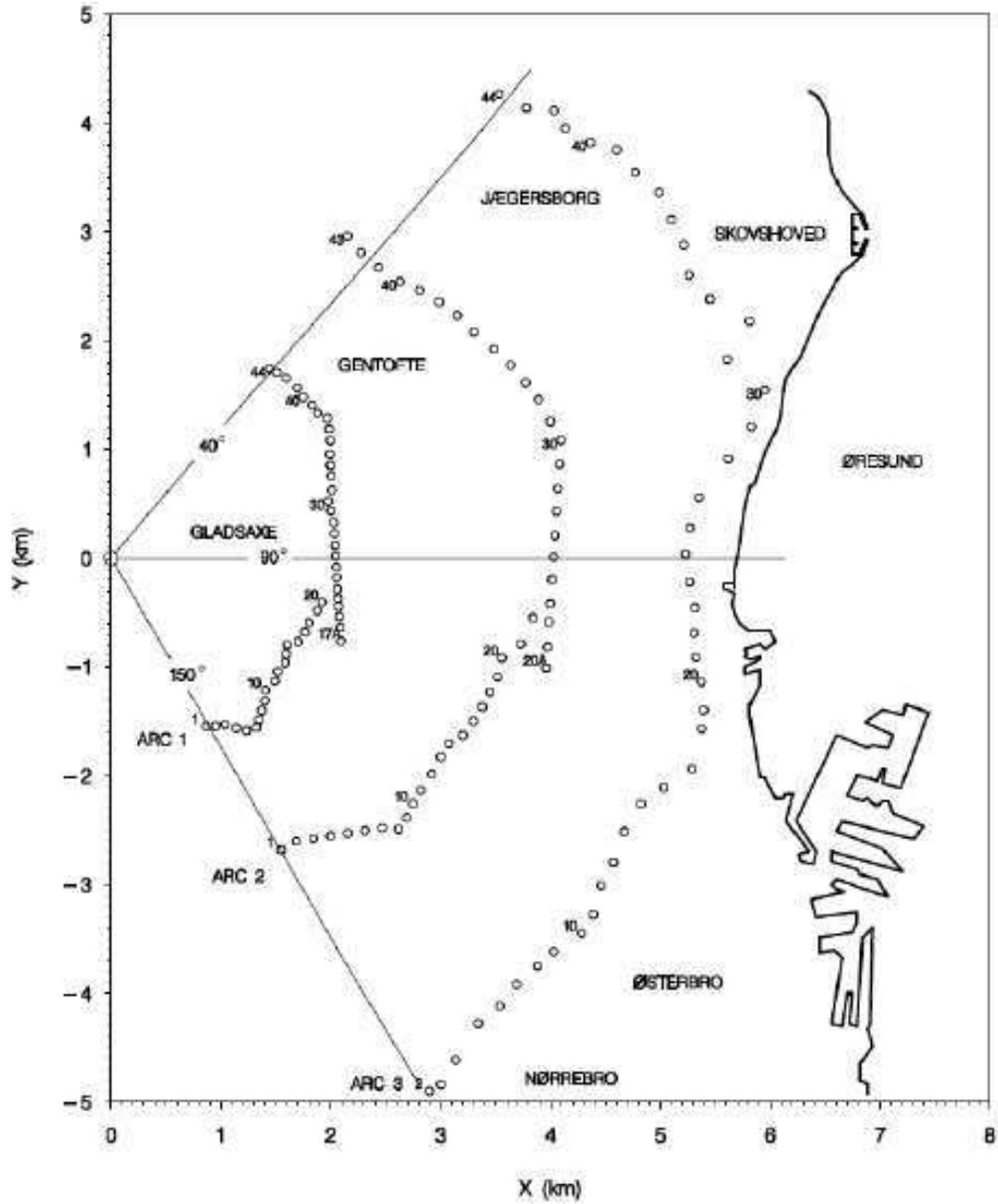


Figura 5.1 - Área utilizada no experimento. O eixo x é a direção Leste, enquanto o eixo y a direção Norte da região. Os pontos de coleta foram distribuídos formando três arcos. O gás traçador foi lançado da posição $(x,y) = (0,0)$ (Gryning, 1998).

Tabela 5.1 – Dados principais do experimento de Copenhagen

| Experimento 1978/79 | Tempo/Duração do Experimento | Distância dos arcos de medição até o ponto de liberação do traçador (km) | Taxa de liberação (g/s) | Concentração integrada (10 ⁻⁴ s/m ²) |
|------------------------|---------------------------------|--|----------------------------|---|
| 20/09/78 | 13:17 / 14:17 | 1.9 / 3.7 | 3.2 | 6.48 / 2.31 |
| 26/09/78 | 11:40 / 12:40 | 2.1 / 4.2 | 3.2 | 5.38 / 2.95 |
| 19/10/78 | 12:13 / 13:13 | 1.9 / 3.7 / 5.4 | 3.2 | 8.20 / 6.22 / 4.3 |
| 03/11/78 | 13:20 / 14:20 | 4.0 | 2.3 | 11.66 |
| 09/11/78 | 13:30 / 14:30 | 2.1 | 3.2 | 6.72 |
| 30/04/79 | 13:02 / 13:42 | 2.0 / 4.2 / 6.1 | 3.1 | 3.96 / 2.22 / 1.83 |
| 27/06/79 | 12:45 / 13:45 | 2.0 / 4.1 / 5.3 | 2.4 | 6.70 / 3.25 / 2.23 |
| 06/07/79 | 12:50 / 13:50 | 1.9 / 3.6 / 5.3 | 3.0 | 4.16 / 2.02 / 1.52 |
| 19/07/79 | 12:15 / 13:18 | 2.1 / 4.2 / 6.0 | 3.3 | 4.58 / 3.11 / 2.59 |

Tabela 5.2 – Dados meteorológicos do experimento de Copenhagen

| Experimento 1978/79 | L (m) | u^* | Classe de Estabilidade de Pasquill | h (m) |
|------------------------|---------|-------|--|---------|
| 20/09/78 | -46 | 0,37 | C | 1980 |
| 26/09/78 | -384 | 0,74 | C | 1920 |
| 19/10/78 | -108 | 0,39 | C | 1120 |
| 03/11/78 | -173 | 0,39 | C | 390 |
| 09/11/78 | -577 | 0,46 | C | 820 |
| 30/04/79 | -569 | 1,07 | D | 1300 |
| 27/06/79 | -136 | 0,65 | B-C | 1850 |
| 06/07/79 | -72 | 0,70 | B-C | 810 |
| 19/07/79 | -382 | 0,77 | D | 2090 |

Além das categorias de estabilidade de Pasquill, outra maneira de classificar um cenário de dispersão atmosférica é através do grau de convecção, expresso pela razão entre a altura da CLP e o comprimento de Monin-Obuckov (L), onde (Buske, 2004):

$$\frac{h}{|L|} < 5 \text{ convecção fraca;}$$

$$5 < \frac{h}{|L|} < 10 \text{ convecção moderada;} \quad (5.1)$$

$$\frac{h}{|L|} > 10 \text{ convecção alta.}$$

O grau de convecção assim obtidos para cada um dos nove experimentos da Tabela 5.1 são apresentados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3 – Grau de convecção do experimento de Copenhagen

| Experimento | h/L | Grau de Convecção |
|-------------|-------|-------------------|
| 20/09/78 | 43,04 | Alto |
| 26/09/78 | 5,00 | Moderado |
| 19/10/78 | 10,37 | Moderado |
| 03/11/78 | 2,25 | Fraco |
| 09/11/78 | 1,42 | Fraco |
| 30/04/79 | 2,28 | Fraco |
| 27/06/79 | 13,60 | Alto |
| 06/07/79 | 11,25 | Alto |
| 19/07/79 | 5,47 | Moderado |

5.1.1. Domínio de Solução

O domínio utilizado nas simulações de avaliação foi representado por um prisma, sendo caracterizado pelas coordenadas x,y,z sendo x o sentido transversal a pluma de dispersão, y a altura do domínio e z o sentido da dispersão da fonte em direção aos pontos de referência (representação das estações de registro das concentrações) (Figura 5.2). Inicialmente foi estimado um domínio razoavelmente grande para que a dispersão não sofresse influência dos efeitos de bordas causados pelas fronteiras. Desta forma o domínio utilizado nas simulações tem as dimensões de 6 km de largura (transversal a direção de lançamento, coordenada x), 6 km de distância da fonte (sentido das emissões, coordenada z) e 3 km de altura (coordenada y). Para todas as simulações foi utilizado o mesmo domínio, preservando as suas dimensões já citadas anteriormente. O domínio proposto é composto de duas entradas de fluxo e duas saídas. Isso é necessário para representar a decomposição sofrida pelo vetor vento representando desta forma a angulação descrição nos experimentos de campo.

5.1.2. Representação da Fonte de Emissão

A fonte de emissão foi representada por uma fonte pontual de lançamento, que no caso do CFX[®] é utilizada a função “*Source Point*” que simula a liberação de um fluido ou outra variável adicional no domínio de solução. Para todos os experimentos a fonte de lançamento foi representada pela mesma função, e foi postada sempre na mesma posição do domínio: 115 metros de altura em relação a coordenada y (conforme literatura que descreve o experimento); 2 metros em relação ao início do domínio e na posição que representa 3.000 metros na coordenada x (metade do domínio) para melhor observar a dispersão lateral da pluma sem interferência das laterais, já que o domínio é consideravelmente grande. A posição exata da fonte no domínio seguiu as descrições encontradas na literatura que descreve o experimento de Copenhagen (Figura 5.2).

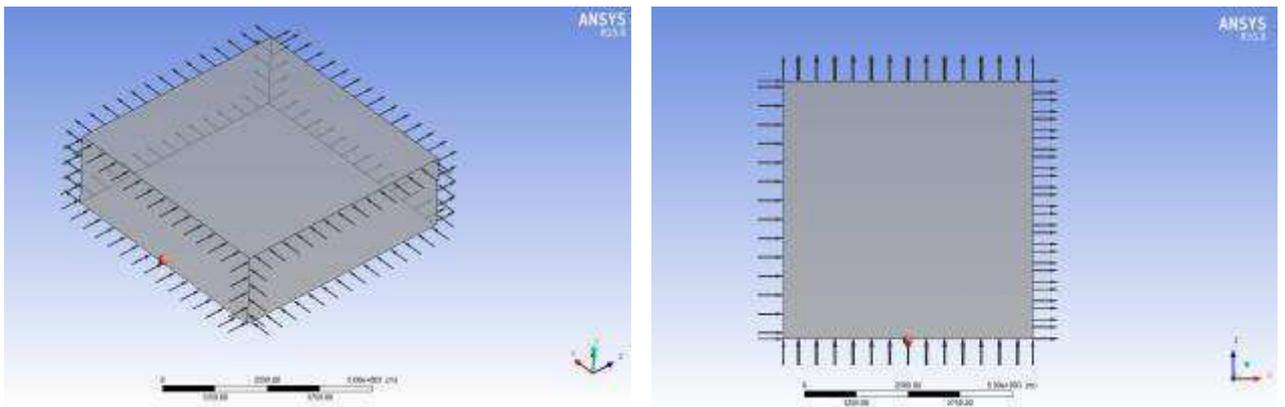


Figura 5.2 – Representação do domínio de solução (vista em perspectiva e vista superior respectivamente), bem como a localização da fonte de lançamento (bola vermelha).

5.1.3. Condições de Contorno

5.1.3.1. Fronteira a Montante

A fronteira a montante representa a entrada principal do fluido no domínio de solução. No caso da dispersão atmosférica simulada neste trabalho, representa a entrada da variável *vento* no domínio. Para representar esta variável (u) foi escolhida a função

“Normal Speed” no CFX®. A equação definida para caracterizar o perfil do vento foi a equação (5.2).

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{y}{y_0} \right) \right] \quad (5.2)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, k a constante de von Kármán, y a variação de altura do domínio e y_0 a altura da rugosidade. Para a velocidade de fricção, a equação utilizada foi:

$$u_* = \frac{ku_{ref}}{\ln \left(\frac{y_{ref}}{y_0} \right)} \quad (5.3)$$

onde u_{ref} é a velocidade do vento medida na altura de referência y_{ref} .

As equações (5.2) e (5.3) foram derivadas das equações propostas por Panofsky e Dutton (1984) desconsiderando os termos que representam a variação de estabilidade (Ψ_m) como demonstrado no capítulo 2, equação (2.5).

A velocidade de referência (u_{ref}) foi decomposta em dois valores escalares de acordo com o ângulo informado no experimento de Copenhagen. Esta foi a forma definida pelo autor para representação fidedigna deste vetor na entrada do domínio de solução.

Por fim, as equações do perfil de vento e velocidade de fricção respectivamente para a montante foram definidas como:

$$u(y) = \frac{u_{montante}}{k} \left[\ln \left(\frac{y}{y_0} \right) \right] \quad (5.4)$$

$$u_* = \frac{ku_{montante}}{\ln \left(\frac{y_{ref}}{y_0} \right)} \quad (5.5)$$

A variável adicional que representa a concentração do poluente (SF_6) foi considerada nula na entrada do domínio, representando desta forma uma análise exclusiva da dispersão da fonte sem valores contribuintes do ambiente a montante da fonte. Desta forma:

$$C_{entrada} = 0 \quad (5.6)$$

Para representar o perfil de temperatura, em função da altitude, na entrada do domínio foi utilizada a equação abaixo:

$$T_{entrada} = T_{ref} - 0.005y \quad (5.7)$$

onde T_{ref} é a temperatura de referência do experimento medido a 10 metros de altura em Kelvin (K).

Para a geração e dissipação de energia cinética e turbulenta respectivamente, foram utilizadas as equações utilizadas por Kim e Baik (2004):

$$k_{entrada}(y) = \frac{1}{C_{\mu}^2} u_*^2 \left(1 - \frac{y}{h}\right)^2 \quad (5.8)$$

$$\varepsilon_{entrada}(z) = \frac{C_{\mu}^{\frac{3}{4}} k_{entrada}(y)^{\frac{3}{2}}}{ky} \quad (5.9)$$

sendo $k=0,4$ e $C_{\mu} = 0,0845$

5.1.3.2. Fronteiras Laterais

As fronteiras laterais representam uma entrada e uma saída transversal ao domínio. Na parede que representa a entrada transversal a equação do perfil de velocidade e da velocidade de fricção, é representada pela velocidade de referência decomposta nesta direção ($u_{lateral}$), similarmente como demonstrado anteriormente. Desta forma, as equações definidas na lateral de entrada foram:

$$u(y) = \frac{u_{lateral}}{k} \left[\ln \left(\frac{y}{y_0} \right) \right] \quad (5.10)$$

$$u_* = \frac{ku_{lateral}}{\ln\left(\frac{y_{ref}}{y_0}\right)} \quad (5.11)$$

Para definir o perfil de temperatura, nesta lateral, foi utilizada a mesma equação da montante, equação (5.7).

Em substituição as equações de geração e dissipação de energia cinética e turbulenta, ainda na parede lateral de entrada, foi utilizada a variável intensidade de turbulência de 1%, representada no CFX[®] por “*Low (intensity 1%)*”. Essa simplificação foi adotada pelo autor para diminuir a quantidade de equações envolvidas no problema e conseguir convergência.

Na parede que representa a saída transversal a condição adotada foi a função “*Static Pressure*” com a pressão fixada em 1atm para todos os experimentos.

5.1.3.3. Fronteira Inferior

A fronteira inferior representa o solo do domínio de solução. Para esta fronteira foi escolhida a função “*rough wall*” usada para representar paredes rugosas. Em todas as simulações o comprimento da rugosidade foi de $y_0 = 0,60$ m conforme descrito no experimento.

Também foi considerado que o solo não absorve e nem reflete a pluma de dispersão, ou seja: não há fluxo de concentrações nesta região.

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad (5.12)$$

5.1.3.4. Fronteira a Jusante

A fronteira a jusante representa a saída principal do fluxo do domínio. Para esta fronteira também foi considerada a função “*Static Pressure*” com o valor fixo de 1 atm.

5.1.3.5. Condições Iniciais

As condições iniciais adotadas em todas as simulações foram a velocidade do vento, seguindo o perfil definido na equação (5.2), a direção do vento (coordenada x) e a pressão do sistema, sempre definida como 1 atm. Outra condição inicial foi informada tratando a condição de concentração nula no início da simulação, já que o gás traçador utilizado nos experimentos não faz parte da condição natural da atmosfera. Também foi informada a difusividade do poluente (SF_6) de acordo com Olivet et al. (2005) *apud* Pfluck (2010):

$$D = 3,45 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (5.13)$$

Para o cálculo da viscosidade turbulenta o autor propôs as funções de amortecimento descritas na Tabela 5.4:

Tabela 5.4 – Funções amortecimento para viscosidade turbulenta propostas pelo autor.

| Experimento | Função Amortecimento | Grau de Convecção |
|-------------|--|-------------------|
| 20/09/78 | $\text{Exp}(0,0025 \times z) \times u_{ref}$ | Alto |
| 26/09/78 | $\text{Exp}(0,0019 \times z) \times u_{ref}$ | Moderado |
| 19/10/78 | $\text{Exp}(0,0015 \times z) \times u_{ref}$ | Moderado |
| 03/11/78 | $\text{Exp}(0,0010 \times z) \times u_{ref}$ | Fraco |
| 09/11/78 | $\text{Exp}(0,0019 \times z) \times u_{ref}$ | Fraco |
| 30/04/79 | $\text{Exp}(0,0010 \times z) \times u_{ref}$ | Fraco |
| 27/06/79 | $\text{Exp}(0,0019 \times z) \times u_{ref}$ | Alto |
| 06/07/79 | $\text{Exp}(0,0025 \times z) \times u_{ref}$ | Alto |
| 19/07/79 | $\text{Exp}(0,0019 \times z) \times u_{ref}$ | Moderado |

5.1.3.6. Malha Computacional

O tipo de malha utilizada neste trabalho é classificada como “não-estruturada” (Figura 5.3). Esta foi a tentativa de garantir ainda mais simplicidade na implantação do

modelo com garantia de aderência aos resultados de campo. A fim de melhorar os resultados na altura dos amostradores a malha foi refinada, utilizando a função “*Refinement*” do CFX[®], na região que representa o solo. Devido ao fato de todos os experimentos serem realizados na mesma escala de comprimento (domínio da solução na forma de prisma) não foi necessário repetir o teste de malha para todos os experimentos. Foi tomando como base o experimento 20/09/1978 para realização dos testes de malha e replicado o resultado final para todos os outros (Tabela 5.5). Este experimento foi tomado como referência simplesmente pelo fato de ser o primeiro da série.

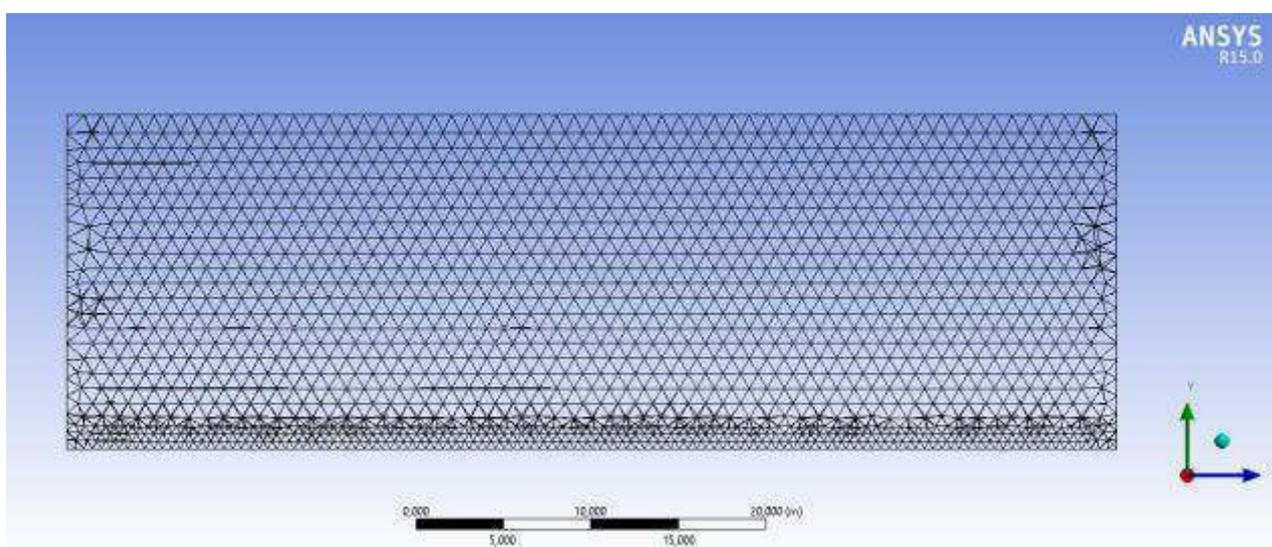


Figura 5.3 – Vista lateral do domínio composto com a malha não estruturada proposta. Malha aplicada a todas as simulações do experimento de Copenhagen.

Tabela 5.5 – Resumo das características da malha (referência: experimento 20/09/78)

| Experimento 20/09/1978 | Número de Volumes de Controle | Fator de Crescimento dos Volumes | Número de Nós |
|---------------------------|----------------------------------|--|------------------|
| 1 | 326596 | 1,2 | 61339 |
| 2 | 470390 | 1,2 | 87460 |
| 3 | 730380 | 1,2 | 134392 |
| 4 | 935427 | 1,2 | 170993 |
| 5 | 1239829 | 1,2 | 225320 |
| 6 | 1700748 | 1,2 | 306931 |

5.1.3.7. Parâmetros Transientes

Mais uma vez o experimento 20/09/1978 foi tomado como referência para a realização dos testes de passo de tempo. Este parâmetro tem fundamental importância na simulação em processos transientes. Escolha de passos de tempo muito reduzido pode aumentar significativamente o tempo de solução podendo tornar a simulação impraticável. Em contrapartida, passos de tempo muito grandes, podem gerar resultados com uma margem de erro significativa. Para realização do teste de passo foi aplicada a malha definida como ótima no teste de malha. Foram testados passos de 30 segundos, 1 minuto, 3 minutos e 5 minutos.

5.1.3.8. Índices Estatísticos

Os índices estatísticos são utilizados para comparação dos resultados obtidos com os resultados de referência. Para tal comparação utilizou-se um programa desenvolvido por Hanna em 1989 [Hanna, 1989], que é reconhecido pela comunidade científica da área de dispersão atmosférica, após o Workshop "*Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessments in Europa*", realizado na Bélgica em 1994 (Degrazia, 2016). Vários autores também utilizaram esses índices nos seus trabalhos para validação de suas teorias, entre os consultados citamos (Albani, 2014), (Meneses, 2015) e (Hoinaski, 2015) O mesmo programa também é recomendado pela USEPA – Agência de Proteção Ambiental Americana (Mello, 2010). Os índices estatísticos aplicados são:

- Erro quadrático médio normalizado: informa sobre todos os desvios entre concentrações dos modelos (C_0) e observadas (C_p). O seu valor ótimo deve ser 0. É definido como sendo:

$$NMSE = \frac{\overline{(C_0 - C_p)^2}}{C_0 C_p} \quad (5.14)$$

- Coeficiente de correlação: descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. O seu valor ótimo deve ser 1. É definido como sendo:

$$Cor = \frac{(\overline{C_0 - C_0})(\overline{C_p - C_p})}{\sigma_0 \sigma_p} \quad (5.15)$$

- Fator de dois: *FA2*: a razão entre C_p e C_0 tem que estar entre 0,5 e 2,0. É definido como:

$$\text{Percentual de dados que estão entre } 0,5 \leq \frac{C_p}{C_0} \leq 2,0$$

- Fator de inclinação: informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero. É definido como sendo:

$$Fb = \frac{\overline{C_0} - \overline{C_p}}{0,5(\overline{C_0} + \overline{C_p})} \quad (5.16)$$

- Desvio fracional padrão: a medida da comparação entre o previsto e o observado da propagação da pluma. O valor ótimo é zero. É definido como sendo:

$$F_s = 2 \frac{\sigma_0 - \sigma_p}{\sigma_0 + \sigma_p} \quad (5.17)$$

6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo serão apresentados os resultados das simulações de avaliação da modelagem e das condições de contorno propostas. Será apresentado o resultado da decomposição do vetor vento e a definição da velocidade de fricção. Será apresentado também o resultado do teste para definição da malha e do teste de passo de tempo. Em seguida, é apresentado o resultado da análise da influência da função amortecimento através de uma avaliação quantitativa. Esta avaliação foi feita comparando os resultados de concentrações obtidas no modelo comparados com os valores registrados nos experimentos de Copenhagen. Para obtenção dos valores de concentração foram seguidas três etapas no CFX[®]: 1^o passo - a geração de uma linha no domínio de solução (função “*Line*”) representando alinha de amostradores em locais específicos que representam os mesmos locais e distâncias do amostradores do experimento de campo. 2^o passo - a utilização da ferramenta “*LenghInt*” que realiza a integração de todos os valores da linha gerada. 3^o passo - divisão do resultado da integração pela taxa de liberação do poluente (em g/s) durante o experimento. Este conceito é conhecido como concentração integrada e tem a unidade de $10^{-4}g/m^2$. Este parâmetro servirá de base para comparação com as concentrações integradas encontradas no experimento de Copenhagen.

Posteriormente, foram realizadas simulações para os 9 experimentos de Copenhagen e os resultados foram convertidos em índices estatísticos para comparação com outros modelos matemáticos de outros autores.

6.1. Definição da Direção do Vetor Velocidade do Vento na Entrada do Domínio

Para que o modelo representasse de forma qualitativa a direção do vetor velocidade do vento em relação a entrada do domínio de solução, o autor propôs a decomposição do vetor considerando que a literatura dispõe do ângulo de entrada para cada experimento de Copenhagen. A fim de demonstrar esta proposição, foi tomado o experimento 20/09/1977 como exemplo da metodologia aplicada a todos os experimentos. No experimento 20/09/1977 o vetor vento entra no domínio com uma angulação de 292° em relação ao eixo central da pluma (Figura 6.1). Desta forma, a velocidade de referência ($u_{ref} = 2,25m/s$) medida a 10 m de altura, será decomposta em:

$$u_{montante} = \left| \cos (292^\circ) \times u_{ref} \right| = 2,22 \text{ m/s} \quad (6.1)$$

$$u_{lateral} = \left| \sin (292^\circ) \times u_{ref} \right| = 0,37 \text{ m/s} \quad (6.2)$$

Essas serão as velocidades de entrada na montante e na entrada lateral do domínio a fim de representar a decomposição da velocidade de referência inicial.

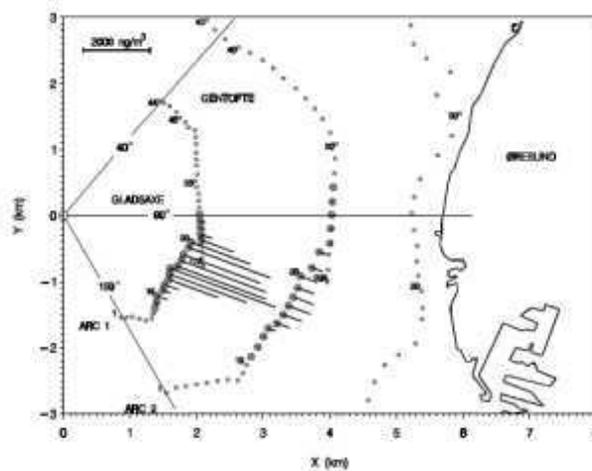


Figura 6.1 – Representação da angulação do vento em relação ao centro da pluma para o experimento realizado em 20/09/1977 em Copenhaga. Angulação de 292°.

Desta forma, para cada experimento, o procedimento de decomposição foi repetido para cada experimento de Copenhaga, definindo a variável de entrada na montante e na lateral do domínio conforme Tabela 6.1.

Tabela 6.1 – Valores da velocidade a montante e na entrada lateral do domínio, definida pela decomposição do vetor velocidade do vento na entrada do domínio.

| Experimento 1978/79 | Angulo de entrada (°) | u_{ref} m/s | $u_{montante}$ m/s | $u_{lateral}$ m/s |
|------------------------|--------------------------|------------------|-----------------------|----------------------|
| 20/09/78 | 292 | 2,25 | 2,22 | 0,37 |
| 26/09/78 | 256 | 5,05 | 5,00 | 0,20 |
| 19/10/78 | 294 | 2,55 | 2,41 | 0,64 |
| 03/11/78 | 243 | 2,60 | 2,40 | 0,69 |
| 09/11/78 | 255 | 3,33 | 2,97 | 0,41 |
| 30/04/79 | 258 | 7,97 | 7,90 | 0,44 |
| 27/06/79 | 265 | 5,00 | 4,97 | 0,53 |
| 06/07/79 | 302 | 4,38 | 4,13 | 1,78 |
| 19/07/79 | 254 | 5,10 | 4,95 | 0,68 |

As Figuras de 6.2 a 6.10 demonstram, que de forma qualitativa, a metodologia de decomposição atendeu muito bem a direção do vetor de velocidade do vento para todos os experimentos de campo tomados como referência. Desta forma, essa foi a metodologia adotada para dar continuidade na avaliação quantitativa do modelo.

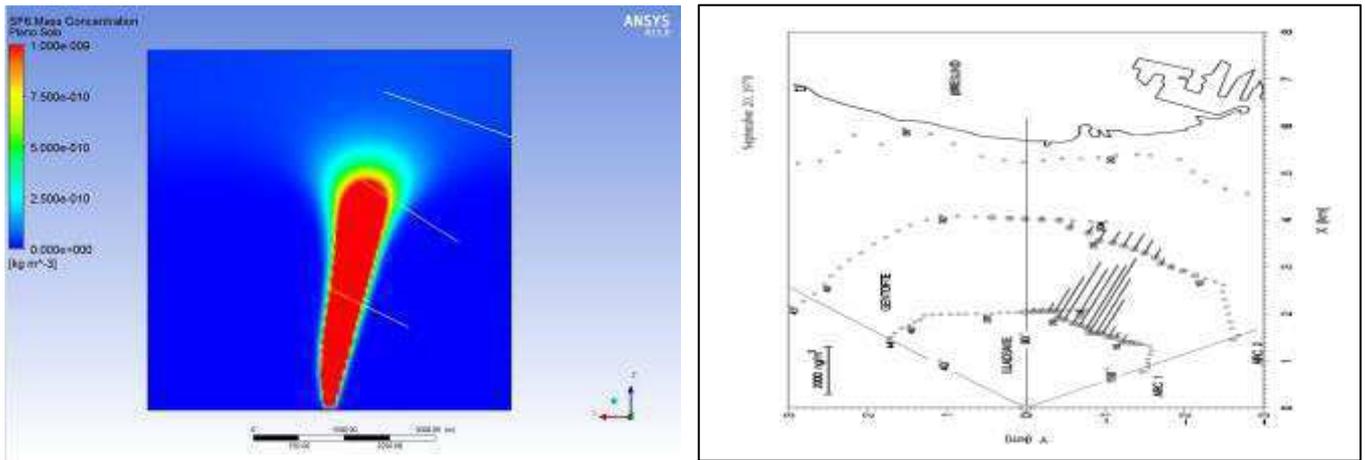


Figura 6.2 – Direção da pluma na simulação do experimento 20/09/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento.

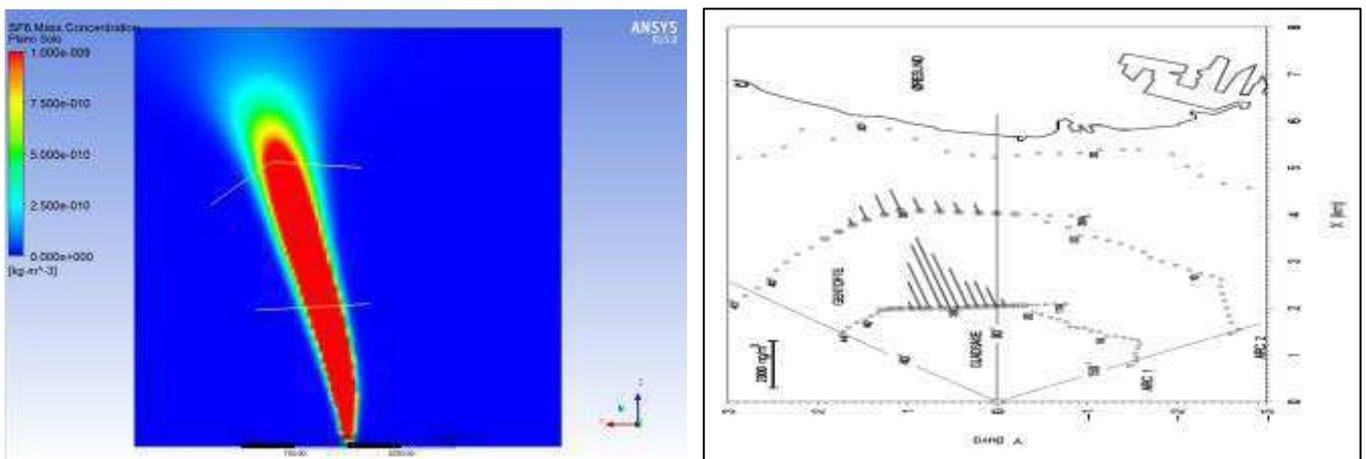


Figura 6.3 – Direção da pluma na simulação do experimento 26/09/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento.

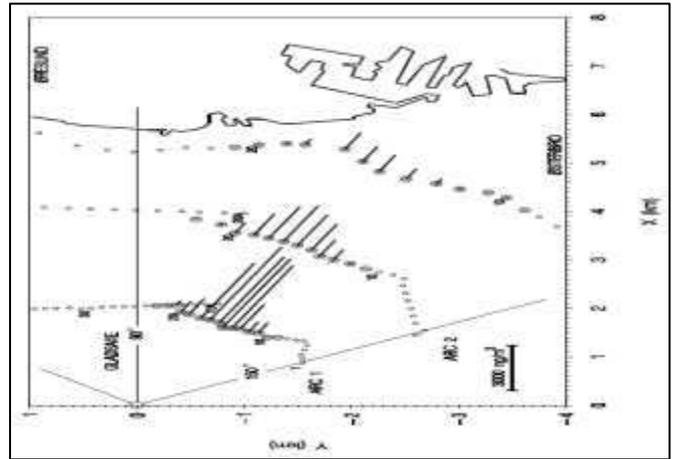
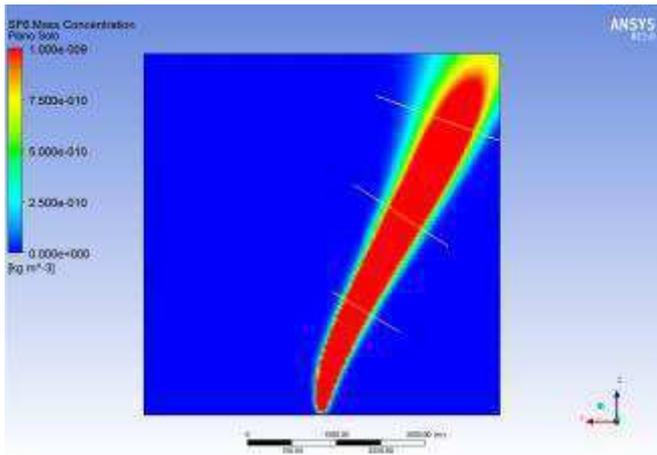


Figura 6.4 – Direção da pluma na simulação do experimento 19/10/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento.

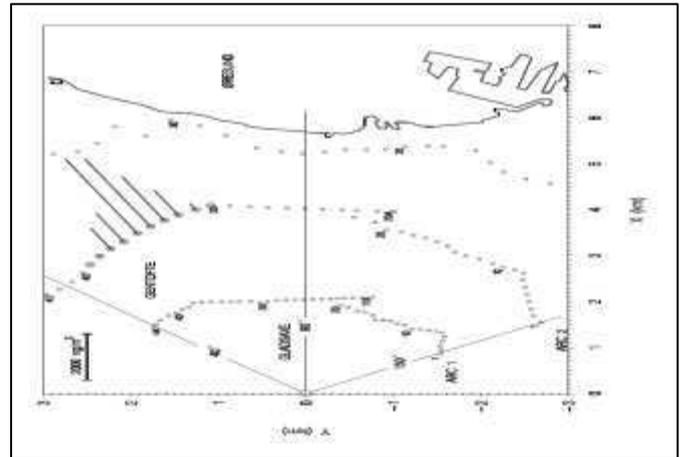
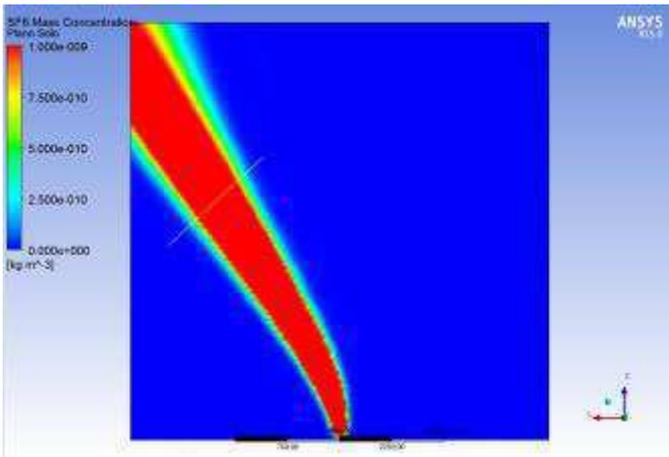


Figura 6.5 – Direção da pluma na simulação do experimento 03/11/1978 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento.

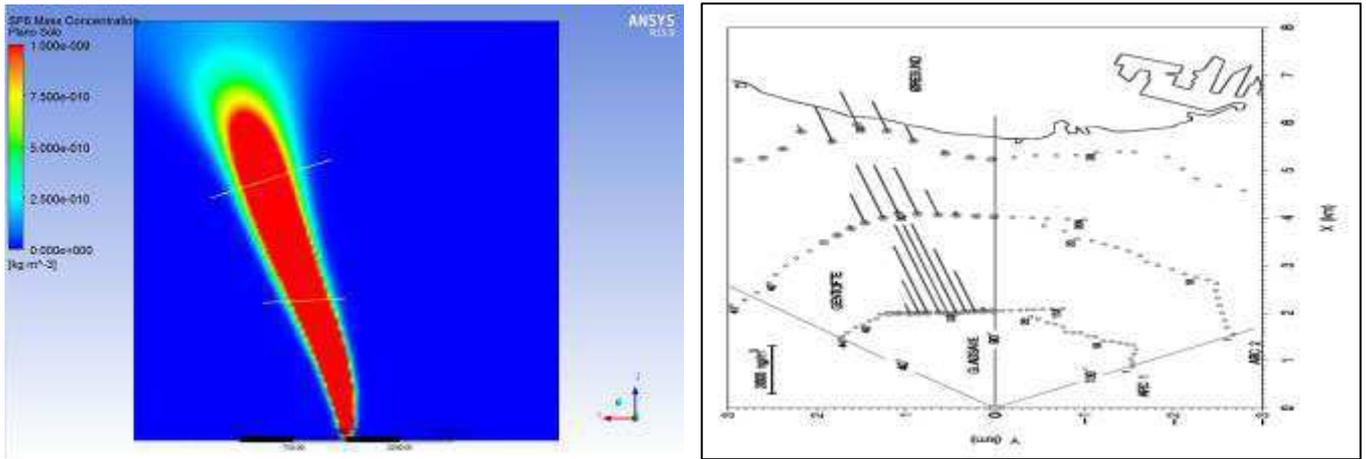


Figura 6.6 – Direção da pluma na simulação do experimento 09/11/1978 de Copenhagen com a decomposição do vetor velocidade do vento.

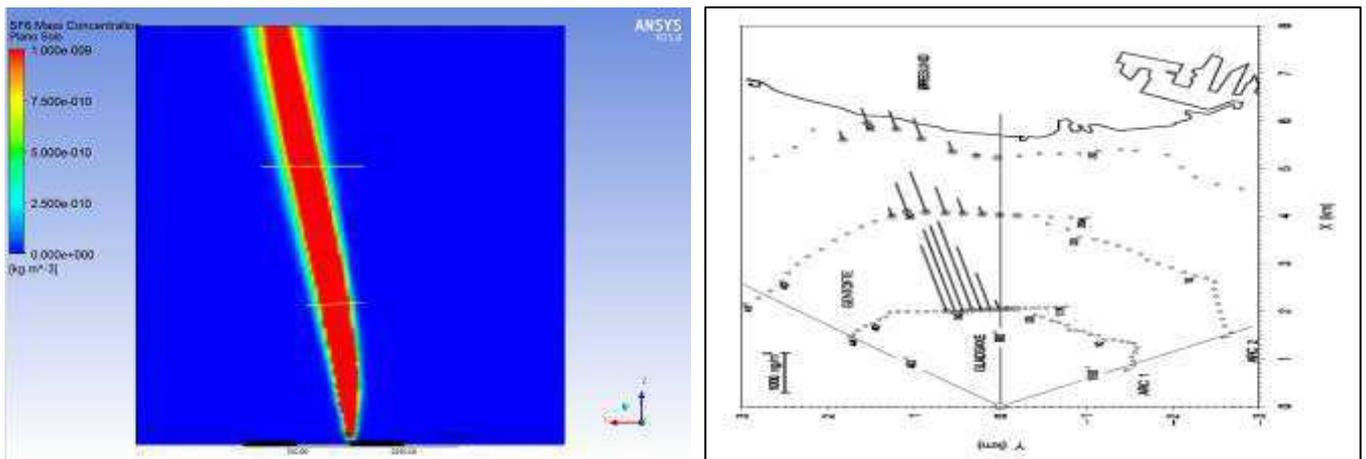


Figura 6.7 – Direção da pluma na simulação do experimento 30/04/1979 de Copenhagen com a decomposição do vetor velocidade do vento.

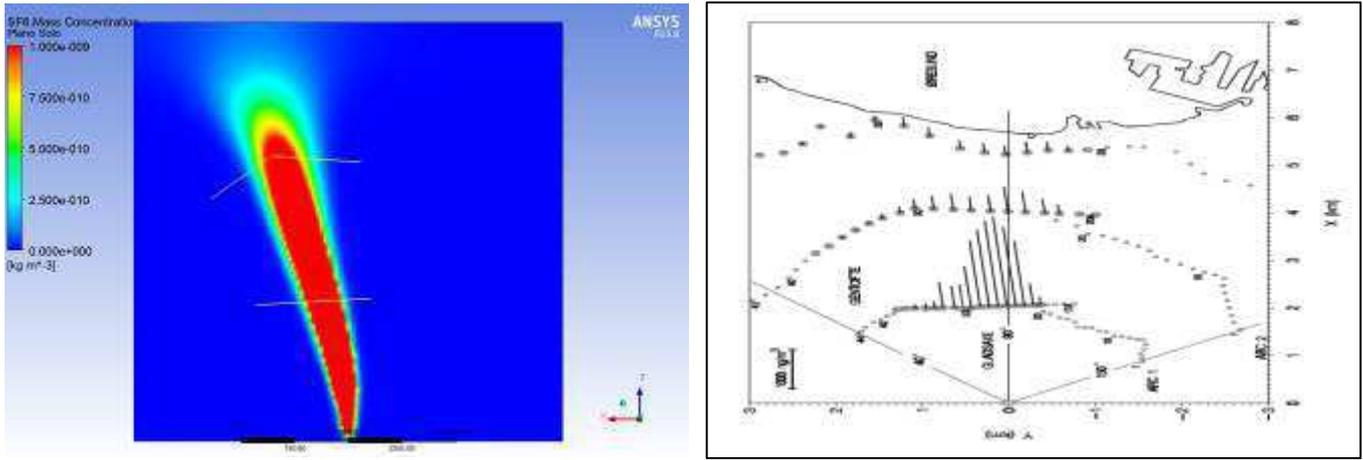


Figura 6.8 – Direção da pluma na simulação do experimento 27/06/1979 de Copenhagen com a decomposição do vetor velocidade do vento.

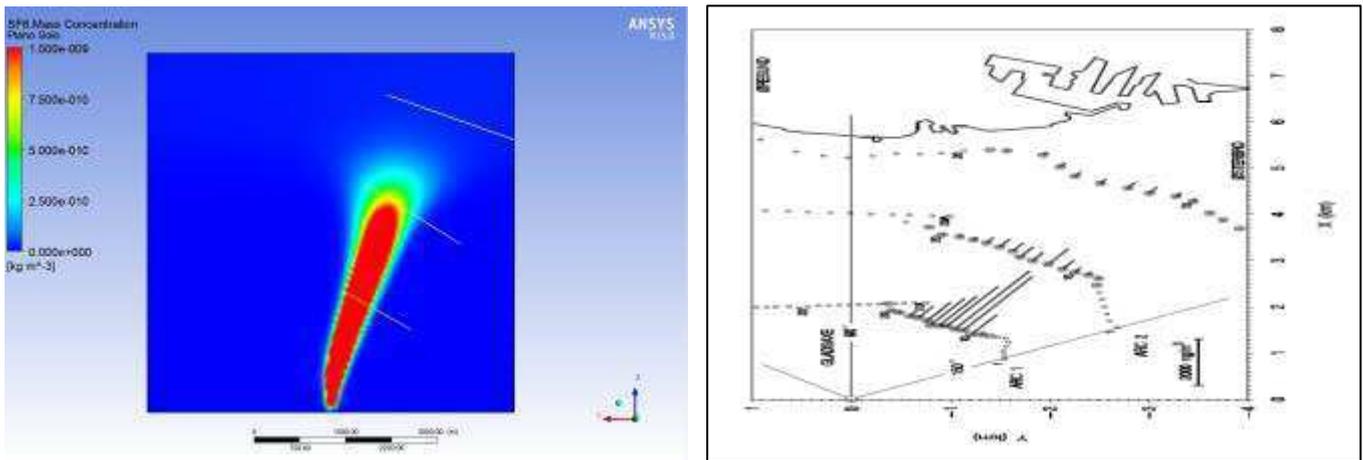


Figura 6.9 – Direção da pluma na simulação do experimento 06/07/1979 de Copenhagen com a decomposição do vetor velocidade do vento.

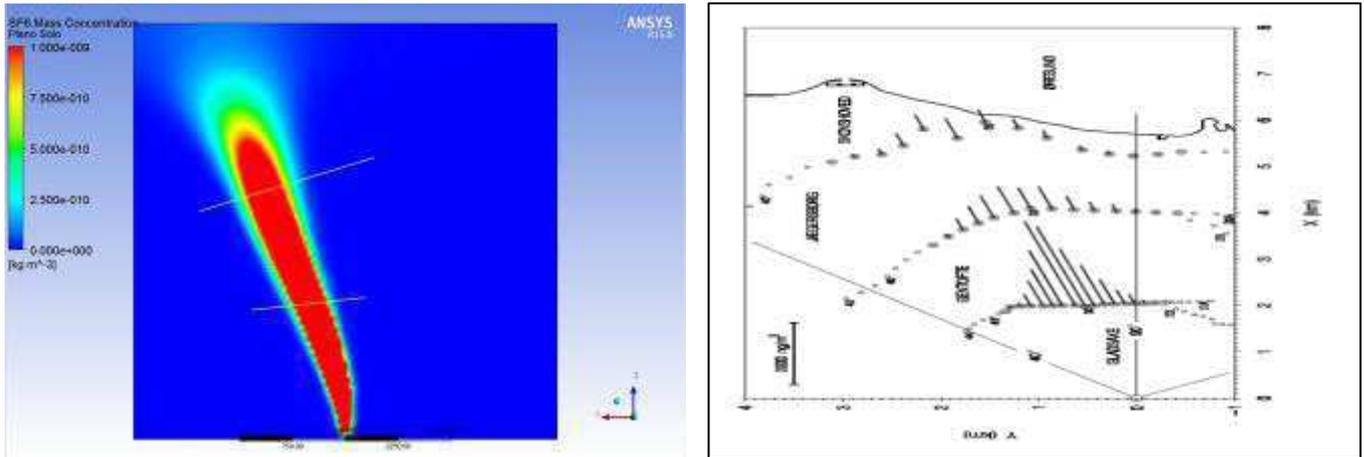


Figura 6.10 – Direção da pluma na simulação do experimento 19/07/1979 de Copenhague com a decomposição do vetor velocidade do vento.

6.2. Teste de Malha

A característica da malha testada foi definida previamente no item 5.1.3.6. O resultado do teste de malha será analisado de forma quantitativa, considerando a concentração integrada de cada teste comparada com a concentração observada no experimento 20/09/1978. As simulações foram feitas com o mesmo passo de tempo de 5 min, no estado transiente, com tempo total de 60 min, conservando todas as outras variáveis iguais, alterando apenas o grau de refinamento da malha. A Tabela 6.2 mostra os resultados encontrados bem como o erro calculado entre as duas medidas: concentração observada no campo versus a concentração integrada do teste.

Tabela 6.2 – Resultados do teste de malha

| Experimento 20/09/1978 | Concentração Integrada Observada (Arc1) (10^{-4} s.m ⁻²) | Concentração Integrada Modelo (Arc1) (10^{-4} s.m ⁻²) | Erro (%) | Concentração Integrada Observada (Arc2) (10^{-4} s.m ⁻²) | Concentração Integrada Modelo (Arc2) (10^{-4} s.m ⁻²) | Erro (%) |
|---------------------------|---|--|-------------|---|---|-------------|
| 1 | 6,48 | 8,23 | 27 | 2,31 | 4,33 | 87 |
| 2 | 6,48 | 8,11 | 25 | 2,31 | 4,29 | 86 |
| 3 | 6,48 | 8,01 | 24 | 2,31 | 4,19 | 81 |
| 4 | 6,48 | 7,98 | 23 | 2,31 | 4,01 | 73 |
| 5 | 6,48 | 7,96 | 23 | 2,31 | 3,99 | 73 |
| 6 | 6,48 | 7,94 | 22 | 2,31 | 3,98 | 72 |

A comparação entre as concentrações integradas obtidas após o refino na malha mostra que existe uma mudança importante do teste de 1 a 4. Vale lembrar que o experimento 20/09/1978 foi tomado como referência para o teste de malha, apenas para que fosse observado o comportamento da variação dos resultados, em função exclusivamente da malha, sem se preocupar com o erro em relação ao resultado experimental de campo. Não foi aplicada nenhuma função amortecimento a fim de melhorar a correlação com os dados de campo. Nota-se que apesar do erro da concentração simulada ser elevado em relação a concentração observada, não há uma variação significativa a partir do teste 4, indicando que um aumento no número de volume de controle do domínio de solução não acarreta em modificação no resultado final da simulação, apenas em aumento da demanda computacional e tempo de processamento. Dessa forma, a malha escolhida foi a malha com grau de refinamento do teste 4.

6.3. Teste de Passo de Tempo

Utilizando a mesma metodologia do teste de malha, o experimento 20/09/1978 foi tomado como referência para o teste de passo de tempo. Mais uma vez, o resultado da concentração integrada foi comparada com o resultado encontrado em campo. Para este teste foi aplicada a malha definida como ótima do teste de malha (teste 4) conservando constante todas as outras variáveis e condições de contorno do experimento. Os passos

de tempo testados foram: 30s (teste 1), 1 min (teste 2), 3 min (teste 3) e 5 min (teste 4). A Tabela 6.3 apresenta os resultados encontrados.

Tabela 6.3 – Resultados do teste de passo de tempo

| Experimento 20/09/1978 | Concentração Integrada Observada (Arc1) (10^{-4} s.m ⁻²) | Concentração Integrada Modelo (Arc1) (10^{-4} s.m ⁻²) | Erro (%) | Concentração Integrada Observada (Arc2) (10^{-4} s.m ⁻²) | Concentração Integrada Modelo (Arc2) (10^{-4} s.m ⁻²) | Erro (%) |
|---------------------------|---|--|-------------|---|---|-------------|
| 1 | 6,48 | 7,98 | 23 | 2,31 | 4,01 | 73 |
| 2 | 6,48 | 7,98 | 23 | 2,31 | 4,01 | 73 |
| 3 | 6,48 | 7,98 | 23 | 2,31 | 4,02 | 74 |
| 4 | 6,48 | 7,99 | 23 | 2,31 | 4,02 | 74 |

Analisando os resultados finais do teste de passo observa-se que não existe uma diferença significativa. Neste caso, é possível utilizar qualquer intervalo entre 30 segundo e 5 minutos sem que o resultado final do modelo seja prejudicado. O passo de tempo escolhido foi 60s.

6.4. Teste de Aderência do Cálculo do Perfil Vertical de Vento e Velocidade de Fricção

O experimento de Copenhagen dispõe de uma série de valores de velocidade de vento medidos em diferentes alturas, definindo assim um perfil vertical para cada experimento. Com isso, é possível fazer uma comparação entre os valores calculados e os medidos em campo. Para testar a aderência da equação proposta para definição do perfil vertical de vento, foram utilizadas como referências as medidas descritas no experimento de Copenhagen feitas a 10 m e 120 m de altura. Desta forma, aplicando a equação (5.2) para esses mesmos pontos foi possível calcular o erro entre a velocidade calculada e a medida em campo (Tabela 6.4).

Tabela 6.4 – Comparação do valor da velocidade medida em campo com a velocidade calculada em diferentes alturas.

| Experimento | Velocidade medida em y = 10 (m.s ⁻¹) | Velocidade medida em y = 120 (m.s ⁻¹) | Velocidade calculada em y = 10 (m.s ⁻¹) | Velocidade calculada em y = 120 (m.s ⁻¹) | Erro em y = 10m (%) | Erro em y = 120m (%) |
|-------------|--|---|---|--|---------------------|----------------------|
| 20/09/78 | 2,25 | 4,10 | 2,51 | 4,59 | 11 | 12 |
| 26/09/78 | 5,05 | 10,07 | 5,17 | 9,43 | 2 | 6 |
| 19/10/78 | 2,55 | 5,24 | 2,49 | 4,55 | 2 | 13 |
| 03/11/78 | 2,60 | 4,00 | 2,47 | 4,51 | 5 | 13 |
| 09/11/78 | 3,33 | 6,34 | 3,00 | 5,60 | 10 | 12 |
| 30/04/79 | 7,97 | 14,00 | 8,17 | 14,9 | 2,5 | 6 |
| 27/06/79 | 5,00 | 7,34 | 4,97 | 7,43 | 0,7 | 1 |
| 06/07/79 | 4,38 | 9,70 | 4,62 | 8,49 | 5 | 12 |
| 19/07/79 | 5,10 | 10,20 | 5,14 | 9,37 | 8 | 8 |
| Média | - | - | - | - | 5,13 | 9,22 |

Outra equação testada foi a proposta para o cálculo da velocidade de fricção (equação 5.3), uma vez que a literatura que descreve o experimento de Copenhagen dispõe das mesmas. Os resultados estão apresentados na Tabela 6.5.

Tabela 6.5 – Comparação do valor da velocidade de fricção (u_*) do modelo com os dados do experimento de Copenhagen

| Experimento 1978/79 | L (m) | u_* Observada | u_* Modelo | Erro (%) |
|---------------------|-------|-----------------|--------------|----------|
| 20/09/78 | -46 | 0,37 | 0,35 | 5 |
| 26/09/78 | -384 | 0,74 | 0,71 | 4 |
| 19/10/78 | -108 | 0,39 | 0,34 | 13 |
| 03/11/78 | -173 | 0,39 | 0,34 | 13 |
| 09/11/78 | -577 | 0,46 | 0,42 | 0 |
| 30/04/79 | -569 | 1,07 | 1,12 | 5 |
| 27/06/79 | -136 | 0,65 | 0,56 | 14 |
| 06/07/79 | -72 | 0,70 | 0,64 | 9 |
| 19/07/79 | -382 | 0,77 | 0,71 | 8 |
| Média | - | - | - | 7,89 |

De acordo com as Tabelas 6.4 e 6.5, podemos concluir que as equações que definem tanto o perfil vertical de vento quanto a velocidade de fricção, propostas neste trabalho, atenderam muito bem a tentativa de definir uma equação que representasse o fenômeno descrito fisicamente no experimento de Copenhague. Para o perfil de velocidade calculado a 10m de altura o erro, em relação ao valor medido em campo, foi de 5,13% em média. A variação nesta altura foi de valor mínimo de 0,7% para o experimento do dia 27/06/79, e valor máximo de 11% para o experimento do dia 20/09/78. Para a altura de 120m, o erro médio de todos os experimentos foi de 9,22%. Neste caso, o valor mínimo foi de 1% para o experimento do dia 27/06/79 e 13% para dois experimentos, 19/10/78 e 03/11/78. Estes erros podem ser considerados muito baixos, uma vez que os dados disponíveis na literatura que descreve o experimento de Copenhague, são resultantes de médias diárias, que já trazem um erro de aproximadamente 10% em relação aos valores horários obtidos. Conseqüentemente, a velocidade de fricção também apresentou um erro com uma grandeza próximo dos valores encontrados na velocidade. De fato, a Tabela 6.5 apresenta um erro médio de 7,89% o que também é considerado um excelente resultado. Desta forma, foi possível aplicar as equações propostas para a definição do perfil da velocidade do vento, bem como para o cálculo da velocidade de fricção, sem a necessidade de ajustes empíricos em função da estabilidade atmosférica.

6.5. Avaliação da Influência da Função Amortecimento

Com o objetivo de evidenciar a importância da função amortecimento (f_{μ}), neste caso a variação da viscosidade turbulenta em função da distância, como apresentado pelo autor, dois experimentos de Copenhague foram tomados como referências e simulados nas mesmas condições de contorno, variando apenas a definição da viscosidade turbulenta. Dois experimentos foram usados como base para a simulação. Em ambos os casos duas situações foram propostas:

- 1) Simulação realizada sem a função amortecimento;
- 2) Simulação realizada, com as mesmas condições de contorno do item 1), com a função amortecimento proposta neste trabalho.

Também foi testada a sensibilidade da função amortecimento em relação a classe de estabilidade. O experimento de 26/09/1978 foi realizado na condição atmosférica instável. Posteriormente o autor realizou a mesma demonstração utilizando um experimento 19/07/1978 com a classe de estabilidade neutra.

- **Experimento 26/09/1978**

A Tabela 6.6 apresenta os resultados do experimento 26/09/1978 simulado sem a aplicação e com a aplicação da função amortecimento. Os resultados Teste 1 (arco 1) e Teste 1 (arco 2) representam as concentrações integradas dos arcos 1 e 2 respectivamente, da simulação do experimento sem adição de função amortecimento, utilizando apenas a função “parede” padrão do CFX[®]. Já os resultados Teste 2 (arco 1) e Teste 2 (arco 2) representam as concentrações integradas do arco 1 e 2 respectivamente, da simulação com o uso da função amortecimento proposta para os experimentos com classe de estabilidade instável (classe C de Pasquill). Para o Teste 2 (arcos 1 e 2) foi aplicada a função amortecimento descrita na equação (6.3) retirada da Tabela 5.4. O comportamento das plumas de dispersão foi apresentado na Figura 6.11.

$$(f_{\mu}) = \text{Exp}(0,0019 \times z) \times u_{ref} \quad (6.3)$$

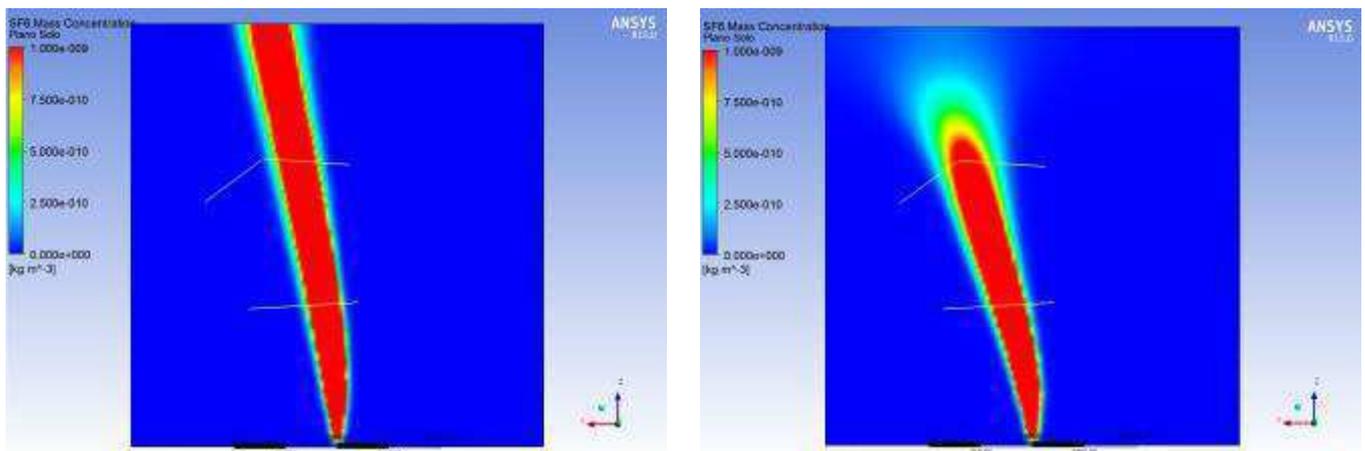


Figura 6.11 – Representação da dispersão atmosférica do experimento 26/09/78 sem a variação da viscosidade turbulenta (à esquerda), e a dispersão com a utilização de equação empírica correlacionando a viscosidade turbulenta com a distância (à direita).

Tabela 6.6 – Resultados comparativos de simulações com a aplicação da função amortecimento – experimento 26/09/1978

| Experimento | Concentração Integrada Observada (10^{-4} s.m ⁻²) | Concentração Integrada Modelo (10^{-4} s.m ⁻²) | Erro (%) |
|------------------|--|---|----------|
| Teste 1 (Arco 1) | 5,38 | 4,95 | 8,0 |
| Teste 2 (Arco 2) | 2,95 | 4,49 | 52 |
| Teste 3 (Arco 1) | 5,38 | 4,95 | 8,0 |
| Teste 4 (Arco 2) | 2,95 | 3,27 | 11,0 |

• **Experimento 19/07/1978**

A avaliação da função amortecimento no experimento 19/07/1978 foi realizado da mesma forma que demonstrado anteriormente no experimento 26/09/1978. Na primeira simulação não foi adicionada nenhuma equação que representasse uma função amortecimento. Na segunda simulação foi aplicada a função amortecimento (equação 6.3). Os resultados das simulações foram apresentados na Tabela 6.7, bem como o comportamento da pluma foi apresentado na Figura 6.12.

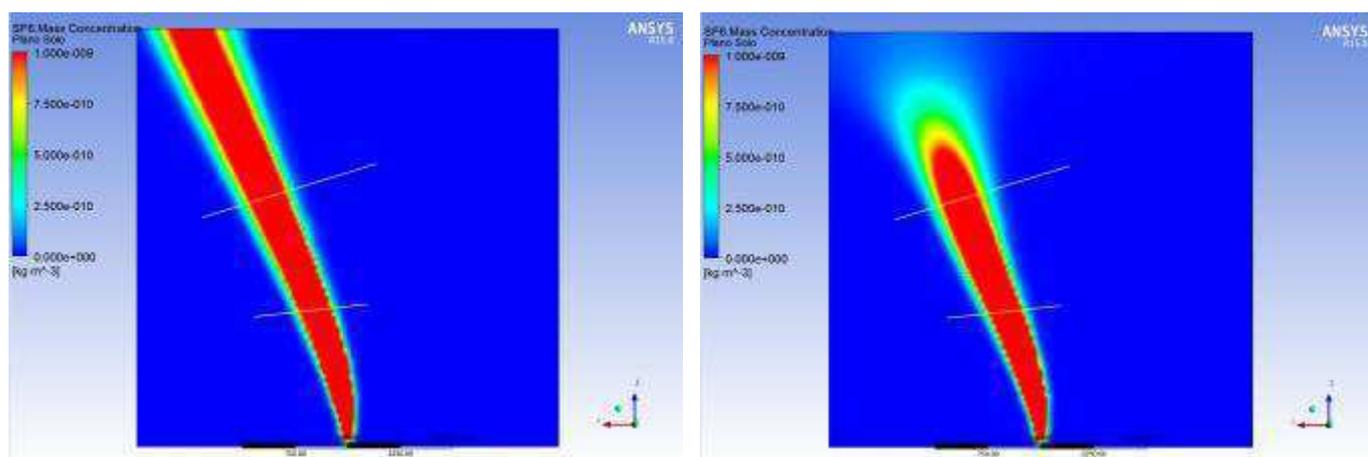


Figura 6.12 – Representação da dispersão atmosférica do experimento 19/07/1978 sem a variação da viscosidade turbulenta (à esquerda), e a dispersão com a utilização de equação empírica correlacionando a viscosidade turbulenta com a distância (à direita).

Tabela 6.7 – Resultados Comparativos de Simulações com a Aplicação da Função Amortecimento – experimento 19/07/1978

| Experimento | Concentração Integrada Observada (10^{-4} s.m ⁻²) | Concentração Integrada Modelo (10^{-4} s.m ⁻²) | Erro (%) |
|------------------|---|--|----------|
| Teste 1 (Arco 1) | 4,58 | 4,45 | 3,0 |
| Teste 1 (Arco 2) | 3,11 | 3,99 | 22,0 |
| Teste 2 (Arco 1) | 4,58 | 4,55 | 0,6 |
| Teste 2 (Arco 2) | 3,11 | 3,27 | 5,0 |

Conforme demonstrado nas Tabelas 6.6 e 6.7 a função amortecimento proposta corrigiu significativamente os resultados das concentrações integradas para os experimentos usados como referência. No caso da dispersão ocorrida em ambiente com estabilidade instável (experimento 26/09/1977) a maior contribuição foi em relação ao arco 2, onde o erro calculado (entre o valor observado e o modelo) caiu de 52% para 11%, quando aplicada a função amortecimento. Para o experimento ocorrido na classe de estabilidade neutra (experimento 19/07/1978) a correção ocorreu tanto no arco 1 (linha mais próxima do lançamento) quanto no arco 2. A diferença de erro entre as duas simulações (com e sem a função amortecimento), foi de 3% para 0,6% para o arco 1 e de 22% para 5% para o arco 2 (Tabela 6.7). Em ambos os experimentos, foi possível confirmar que os resultados melhoraram significativamente quando a viscosidade turbulenta foi corrigida através da função amortecimento, proposta como uma função da distância (coordenada z).

Alguns autores já estudaram e analisaram o comportamento da viscosidade turbulenta variando com funções amortecimentos, fazendo com que o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ fosse adaptado a um escoamento a baixo número de Reynolds. É o caso dos estudos de (Mathur, 2013), (Edeling et al., 2014), (Reeuwijk e Hadžiabdić, 2015), (Wray e Agarwal, 2015), (Igci e Arici, 2016) e (Zhang et al., 2016). No entanto, os referidos estudos fizeram análise de experimentos ocorridos entre placas, ambientes controlados, experimentos com dimensões muito menores que a de um ambiente de dispersão atmosférica, e na maioria deles, utilizaram modelos comparativos de baixo número de Reynolds como os de: (Launder-Sharma, 1974), (Lam-Bremhorst, 1981), (Chien, 1982) e (Abe-Kondoh-Nagano, 1994). Vários desses estudos também propuseram

correções em fatores dos modelos referências, ou até mesmo propuseram novas equações empíricas. Todos os estudos consultados até o momento, fizeram análises detalhas e profundas em funções de amortecimento que variaram com a altura da camada viscosa, ou da distância da parede (coordenada y). Para aprimorar a análise da influência da função amortecimento proposta, foi necessário recorrer a uma avaliação do comportamento de alguns fatores importantes envolvidos na dispersão simulada. Analisando o comportamento da viscosidade turbulenta, em função da altura y , no experimento 26/09/1978 (Figura 6.13) sem a aplicação da função amortecimento, observamos que houve um aumento significativo nos primeiros 100 metros, e posteriormente reduziu até se estabilizar próximo de 0,087 Kg/m.s

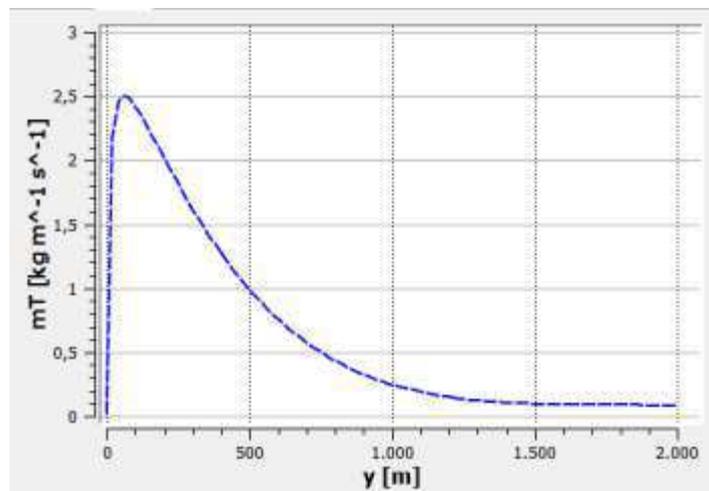


Figura 6.13 – Variação da viscosidade turbulenta com a altura (y) para o experimento 26/09/1978 sem a aplicação da função amortecimento.

Tal comportamento se explica analisando matematicamente a equação (3.28) onde a viscosidade turbulenta foi definida como uma razão entre a energia cinética turbulenta (k) e a taxa de dissipação da energia cinética (ϵ). Ambos os parâmetros são inversamente proporcionais à altura, como mostrado nas equações (5.8) e (5.9) e nas Figuras (6.14) e (6.15) respectivamente.

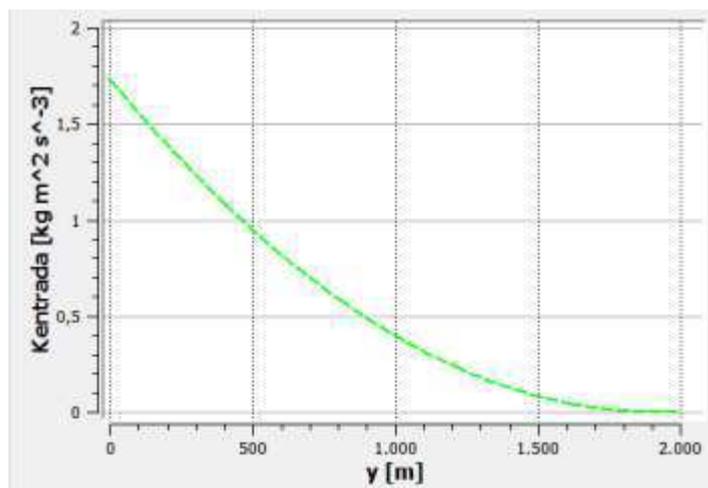


Figura 6.14 – Variação da energia cinética turbulenta (k) com a altura (z) no experimento 26/09/1978 sem a aplicação da função amortecimento.

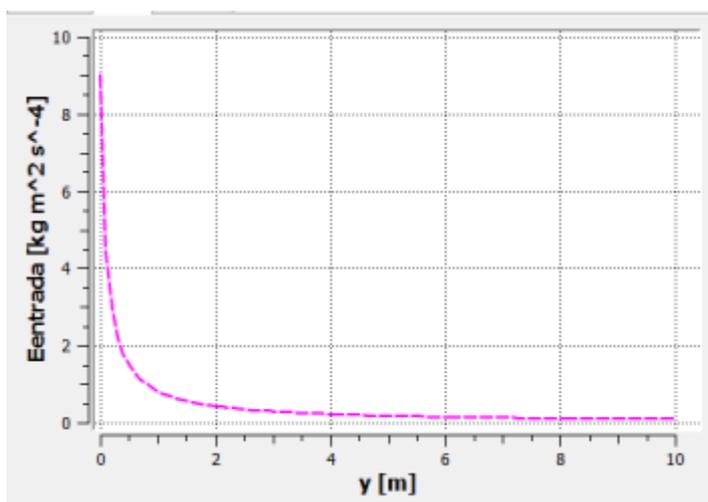


Figura 6.15 – Variação da dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ) com a altura (z) no experimento 26/09/1978 sem a aplicação da função amortecimento.

Logo nos primeiros 10 metros de altura, a dissipação da energia cinética (ϵ) reduziu drasticamente. Por isso a viscosidade turbulenta, sendo inversamente proporcional, subiu consideravelmente até a altura de aproximadamente 100 metros. Neste ponto, energia cinética (k) começa a diminuir se equilibrando com a dissipação (ϵ), sendo que a partir dessa altura a viscosidade turbulenta começa a reduzir na mesma proporção de (k) e (ϵ).

Na altura próxima do solo (viscosidade próxima da parede) o valor da viscosidade turbulenta foi de 0,036 Kg/m.s e variou até 0,61kg/m.s na altura de 2 metros, onde estão

localizadas as estações de amostragem. Isso significa que, na simulação onde não se aplicou a função amortecimento, em função da distância z , o valor em qualquer posição no domínio foi constante para a viscosidade turbulenta. Ou seja, na altura dos amostradores, o valor foi sempre de $0,61\text{kg/m.s}$ independentemente da posição medida em relação ao eixo z . Nesta simulação, as três camadas que definem o tipo de fluxo (turbulento ou laminar) são constantes e não sofrem nenhum tipo de influência significativa entre elas (Figura 6.16). Em relação a distância, a viscosidade turbulenta seguiu a definição da equação (6.3), aumentando exponencialmente com a distância do lançamento, conforme intenção prevista de aumentar a viscosidade turbulenta para aumento da mistura (Figura 6.17).

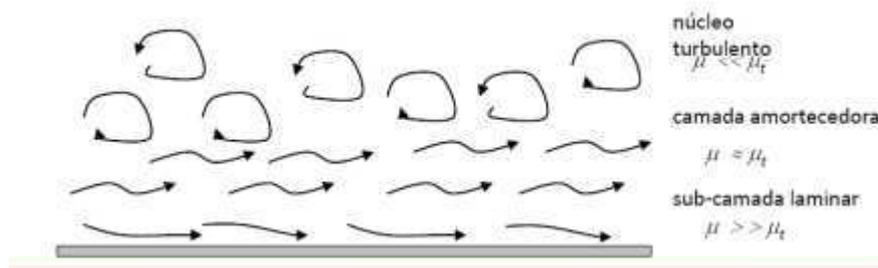


Figura 6.16 – Representação das camadas de escoamento distribuídas em função da distância (z) (Rosa, 2003)

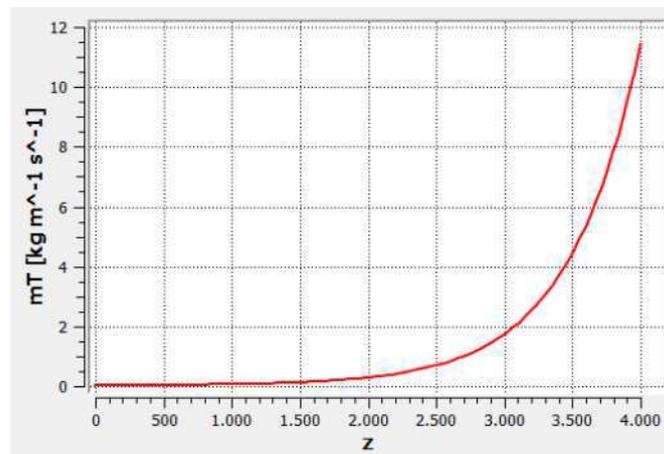


Figura 6.17 – Representação da variação da viscosidade turbulenta em função da distância (z) com base na função amortecimento proposta.

De fato, a afirmação de constância para as camadas do fluxo não é totalmente verdadeira, pois em condições normais, a atmosfera sofre alterações significativas em função da sua escada e das várias interferências do meio. Em regimes turbulentos ocorrem trocas turbilhonar de movimento que afetam as camadas adjacentes podendo alterar a característica do escoamento (Figura 6.18). A variação do vetor vento dentro do domínio é um dos fatores que afetam diretamente a característica laminar ou turbulenta do fluxo. As Figuras (6.19) e (6.20) mostram como ocorre a variação do perfil do vento em planos (x,z) , com alturas diferentes para o experimento 26/09/1978, sem a aplicação da função amortecimento e após aplicação da função.

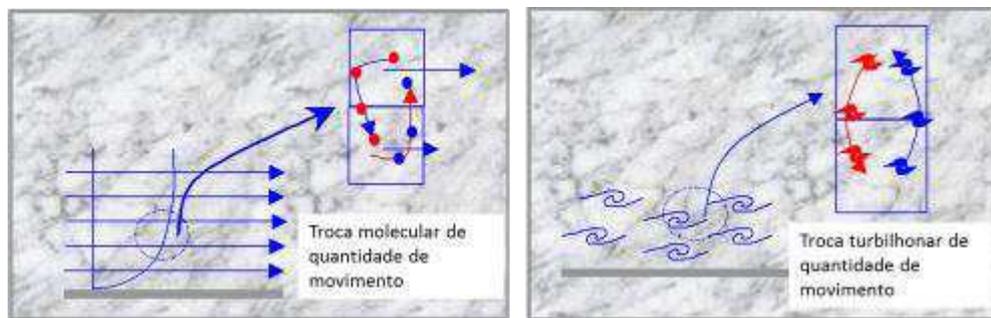


Figura 6.18 – Representação da troca de movimento entre camadas do escoamento.

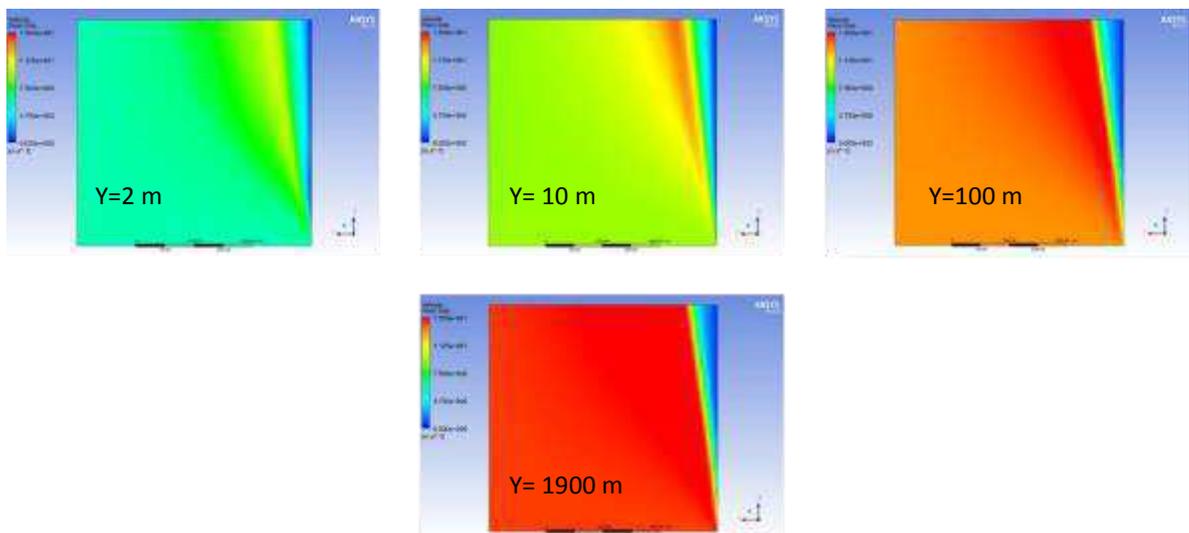


Figura 6.19 – Variação do perfil do vento em planos (x,z) variando de 2 metros de altura até 1900 metros sem aplicação da função amortecimento. μ_t constante com a distância (coordenada z).

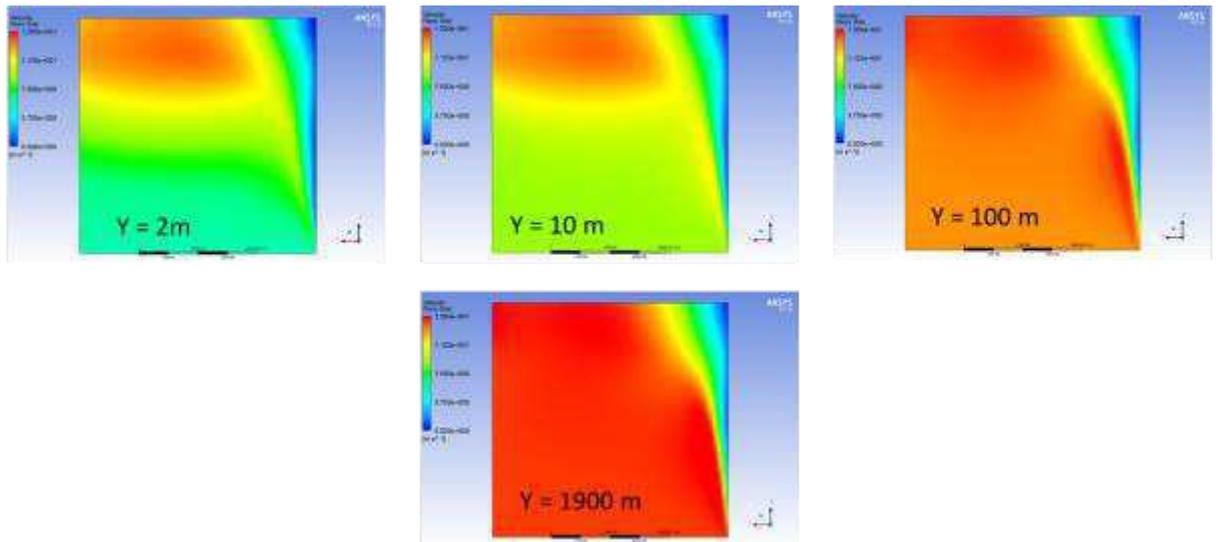


Figura 6.20 – Variação do perfil do vento em planos (x,z) variando de 2 metros de altura até 1900 metros quando aplicada a função amortecimento. μ_t variando com a distância (coordenada z).

A Figura (6.19) mostra que o perfil do vento na mesma altura, sofre pouca variação em relação a distância, preservando assim as camadas viscosas e turbulentas distintas. Neste caso, a variação ocorreu de forma mais intensa apenas em função da altura. Sem influência de uma camada para outra. Já na Figura (6.20) a variação ocorreu uma variação significativa no vetor vento em função da altura e da distância da entrada do domínio, caracterizando um escoamento com forte troca turbilhonar entre camadas. Foram registradas variações de velocidade do vento de 5 m/s até regiões com 10 m/s na mesma altura (mesmo plano).

Uma outra análise foi feita com a sobreposição de imagens. A Figura (6.21) representa a pluma de dispersão sobreposta à representação da distribuição do vento no plano (x,z) . Neste caso, observa-se que o direcionamento da pluma segue a decomposição do vetor vento no domínio (entrada lateral ao fluxo principal) como já demonstrado anteriormente, mas a dispersão ocorre de forma similar a um escoamento laminar com pouco “espalhamento” não representando o resultado quantitativo do experimento de campo. Após a aplicação da função amortecimento, observa-se que a variação do perfil do vento na mesma camada, e entre camadas, ocorreu de forma mais intensa garantindo maior turbulência, e conseqüentemente um grau de mistura maior em todo o domínio (Figura 6.22). Esta simulação atendeu muito bem a avaliação quantitativa quando comparado com o experimento de campo.

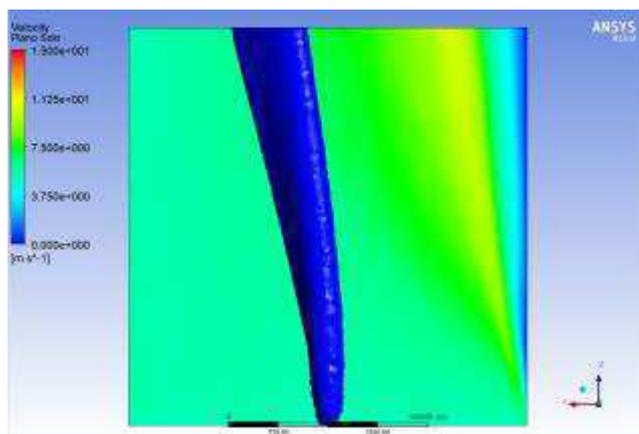


Figura 6.21 – Sobreposição da imagem da pluma com o perfil do vento para o experimento 26/09/1978 sem aplicação da função amortecimento.

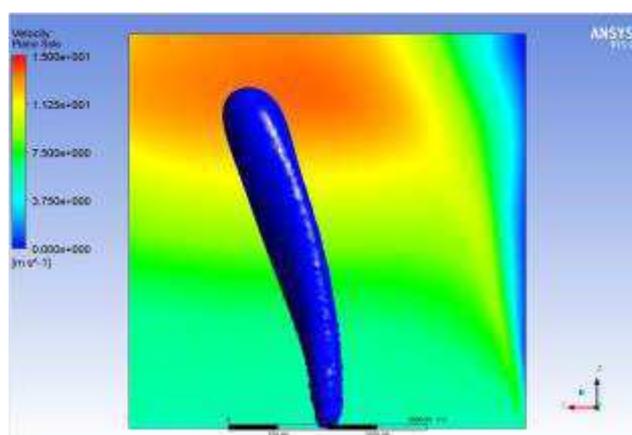


Figura 6.22 – Sobreposição da imagem da pluma com o perfil do vento para o experimento 26/09/1978 com aplicação da função amortecimento.

Por fim, após a constatação da importância da inserção da função amortecimento proposta pelo autor, variando com a distância, foram simulados todos os experimentos de Copenhagen, constando os seus resultados na Tabela 6.8.

Tabela 6.8 – Comparação entre os Valores de Concentrações Integrada do Modelo com o Experimento de Copenhagen

| Experimento | Concentração Integrada Observada (10^{-4} s.m ⁻²) | Concentração Integrada Modelo (10^{-4} s.m ⁻²) | Erro (%) |
|-------------------|---|--|----------|
| 20/09/78 (Arco 1) | 6,48 | 7,87 | 21 |
| 20/09/78 (Arco 2) | 2,31 | 2,15 | 7 |
| 26/09/78 (Arco 1) | 5,38 | 4,95 | 8,0 |
| 26/09/78 (Arco 2) | 2,95 | 3,27 | 11,0 |
| 19/10/78 (Arco 1) | 8,20 | 8,12 | 1,0 |
| 19/10/78 (Arco 2) | 6,22 | 6,65 | 7,0 |
| 19/10/78 (Arco 3) | 4,30 | 4,69 | 9,0 |
| 03/11/78 (Arco 1) | 11,66 | 9,56 | 18 |
| 09/11/78 (Arco 1) | 6,72 | 7,72 | 15 |
| 09/11/78 (Arco 2) | 5,84 | 5,16 | 12 |
| 30/04/79 (Arco 1) | 3,96 | 3,08 | 22 |
| 30/04/79 (Arco 2) | 2,22 | 2,73 | 23 |
| 27/06/79 (Arco 1) | 6,70 | 6,27 | 6 |
| 27/06/79 (Arco 2) | 3,25 | 2,80 | 14 |
| 06/07/79 (Arco 1) | 4,16 | 4,80 | 15 |
| 06/07/79 (Arco 2) | 2,02 | 1,85 | 8 |
| 19/07/79 (Arco 1) | 4,58 | 4,55 | 0,6 |
| 19/07/79 (Arco 2) | 3,11 | 3,27 | 5 |

6.6. Comparação com Outros Modelos Dispostos na Literatura

Os resultados do modelo proposto foram comparados com outros modelos encontrados na literatura (Tabela 6.9), da mesma forma feita por Pfluck (2010) e em Albani (2014). Ou seja: os índices estatísticos do modelo proposto foram comparados com os índices dos modelos dispostos, que por sua vez utilizaram abordagens e metodologias científicas diferente para resolver as equações da dispersão atmosférica. São eles:

- Três modelos que utilizam funções de densidade de probabilidade para a velocidade turbulenta: gaussiana, não-gaussiana e Gram-Charlier (turbulência

gaussiana e não-gaussiana). Método denominado SLI (Solução de Langevin Iterativa) (Carvalho e Vilhena, 2005);

- Três modelos para a solução da equação de Langevin através do cálculo de Ito (Carvalho et al., 2002), utilizando as mesmas funções densidades de probabilidade que os três modelos anteriores supracitados;
- Duas soluções analíticas da equação euleriana (Vilhena et al., 1998) e (Sharan et al., 2006);
- Um modelo euleriano resolvido com a aplicação de diferentes formulações para as difusividades turbulentas (Degrazia et al., 2001);
- Um modelo gaussiano (Degrazia, 1998);
- Uma solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILLT, utilizando diferentes coeficientes de difusão (Buske, 2004);
- Quatro soluções analíticas da equação de transporte advectivo-difusivo tridimensional transiente, incluindo a parametrização para as componentes horizontais do vento médio e difusividade turbulenta vertical (Kumar e Sharan, 2010), (Guerrero et al., 2012), (Aragão, 2012) e (Albani, 2014);
- Duas soluções de um modelo numérico semi-lagrangeano bidimensional (Meneses, 2015).

Tabela 6.9 – Quadro comparativo entre o modelo proposto e outros autores

| Modelo Matemático | NMSE | FB | FS | Corr | FA2 |
|--|-------|-------|-------|------|------|
| Modelo Proposto (Gomes, 2017) | 0,02 | 0,006 | 0,07 | 0,95 | 1,00 |
| SLI_Gaussiano (Carvalho e Vilhena, 2005) | 0,05 | -0,11 | -0,11 | 0,93 | 1,00 |
| SLI_Gaussiano (Carvalho e Vilhena, 2005) | 0,04 | -0,11 | 0,01 | 0,94 | 0,96 |
| SLI_Gram-Charlier (Carvalho e Vilhena, 2005) | 0,03 | 0,01 | 0,03 | 0,93 | 1,00 |
| (Vilhena et al., 1998) | 0,07 | 0,06 | 0,23 | 0,90 | 1,00 |
| Ito-Gaussiano (Carvalho et al., 2002) | 0,06 | 0,09 | 0,27 | 0,91 | 1,00 |
| Ito-Não-Gaussiano (Carvalho et al., 2002) | 0,07 | -0,14 | 0,01 | 0,92 | 1,00 |
| Ito-Gram_Charlier (Carvalho et al., 2002) | 0,08 | -0,02 | -0,06 | 0,82 | 0,96 |
| (Degrazia, 1998) | 0,08 | 0,1 | 0,31 | 0,87 | 1,00 |
| (Sharan et al., 2006) | 0,36 | - | - | - | - |
| (Degrazia et al., (Eq. 1), 2001) | 0,06 | 0,03 | 0,10 | 0,89 | 1,00 |
| (Degrazia et al., (Eq. 2), 2001) | 0,16 | 0,28 | 0,27 | 0,89 | 1,00 |
| (Buske, (Eq.1), 2004) | 0,06 | -0,14 | -0,02 | 0,97 | 1,00 |
| (Buske, (Eq.2), 2004) | 0,02 | 0,01 | 0,05 | 0,97 | 1,00 |
| (Buske, (Eq.3), 2004) | 0,07 | 0,09 | 0,09 | 0,90 | 1,00 |
| (Guerrero et al., 2012) | 0,06 | 0,02 | 0,16 | 0,83 | 0,96 |
| (Kumar e Sharan, 2010) | 0,086 | 0,12 | 0,65 | 0,83 | 1,00 |
| (Aragão, 2012) | 0,07 | 0,02 | 0,2 | 0,83 | 0,96 |
| (Albani, 2014) | 0,06 | 0,11 | 0,16 | 0,86 | 1,00 |
| S-L Grade 2 - Degrazia (Meneses, 2015) | 0,06 | 0,10 | 0,19 | 0,87 | 1,00 |
| S-L Grade 2 – Ulke (Meneses, 2015) | 0,08 | 0,16 | 0,23 | 0,86 | 1,00 |

De acordo com Degrazia, 2016, o *FA2* é provavelmente a medida mais robusta de performance, devido a sua pequena insensibilidade a valores discrepantes. Valores de *FA2* iguais a 100% (ou 1) indicam que todos as estimativas estão entre a metade e duas vezes o valor dos dados observados. Ou seja, o *FA2* representa a porcentagem de acerto das estimativas, dentro de um limite aceitável. Para valores de *FA2* próximo de 0,5 a indicação é de que o modelo subestimou os resultados de referência. Já para valores próximos de 2, significa que o modelo superestimou. Desta forma, um resultado consistente de aderência é próximo de 1. Com isso, podemos afirmar que o modelo proposto apresentou de forma geral um bom resultado, pois o valor de *FA2* foi exatamente 1.

O *NMSE* abrange tanto erros sistemáticos quanto aleatórios, mas pode ser influenciado pela presença de valores extremos, mesmo quando ocorrem poucas vezes. Uma aproximação perfeita entre observações e previsões apresenta *NMSE* igual a 0 (Chang et al., 2004). Para o modelo proposto o resultado foi de um *NMSE* igual a 0,02. Foi o menor valor quando comparado com os outros autores.

Outro índice estatístico utilizado para avaliar a sensibilidade do modelo em superestimar ou subestimar foi o *Fb*. Neste caso o valor ótimo deve ser próximo de zero. Para o modelo proposto o resultado foi de 0,006. Para avaliar o grau de concordância entre as variáveis, ou correlação, foi utilizado o índice *Corr*. Para definir como bom desempenho o seu valor deve ser próximo de 1. Para o modelo proposto o valor encontrado foi de 0,95. Novamente, pontuando entre os melhores quando comparado com as referências.

Avaliando os parâmetros estatísticos que foram utilizados para verificar a performance do método de determinação dos coeficientes de dispersão, na tentativa de estimar as observações em campo, observamos que o modelo proposto apresentou um bom desempenho mesmo quando comparado com diferentes modelos propostos por outros autores. O que torna as proposições robustas suficientes na determinação de um modelo de previsão da qualidade do ar.

7. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi proposto um modelo matemático, baseado em CFD, para previsão e análise da dispersão de poluentes na atmosfera. O modelo utilizado para o fechamento dos termos de turbulência foi o modelo k - ε padrão com a introdução de funções amortecimentos responsáveis pelo ajuste da viscosidade turbulenta ao longo do domínio. A validação do modelo foi feita através de simulações dos experimentos de Copenhagen, índices estatísticos e comparação com resultados de outras pesquisas encontradas na literatura que simularam os mesmos experimentos (nas mesmas condições de contorno).

Os resultados obtidos através das simulações do experimento de Copenhagen mostraram a importância da adição de funções amortecimentos para ajuste da viscosidade turbulenta na direção do lançamento do poluente. Em simulações executadas sem a adição de tais funções, com a viscosidade turbulenta constante na direção de z , a dispersão da pluma apresentou um escoamento próximo do laminar, com pouca dispersão do poluente ao longo do domínio. Esses resultados não representaram de forma quantitativa o experimento de campo. As concentrações integradas pouco reduziram com o avanço da pluma demonstrando uma característica similar ao escoamento laminar. Os resultados das concentrações integradas melhoraram significativamente quando a função amortecimento foi adicionada, elevando a viscosidade turbulenta ao longo do domínio. Neste caso, pôde-se observar um aumento importante no nível de turbulência, e conseqüentemente maior mistura, na direção do lançamento do poluente, causando uma dispersão maior e se aproximando dos resultados de campo.

A necessidade de correção da viscosidade turbulenta no modelo k - ε padrão, ocorre devido ao caráter isotrópico do modelo que impossibilita a reprodução da turbulência encontrada em atmosferas estratificadas, fazendo com que resultados de simulações em atmosferas de elevada convecção apresentem discrepâncias significativas quando comparados com experimentos reais de campo. A turbulência tem como característica altos níveis de anisotropia, sobretudo para as grandes escalas dos escoamentos. Isto diz que, tomar a viscosidade turbulenta como uma grandeza não tensorial, pode ser uma aproximação comprometedora. A viscosidade molecular é uma propriedade do fluido e a viscosidade turbulenta uma característica do escoamento. Desta forma, é necessário modelar a viscosidade turbulenta considerando as variações e flutuações existentes no escoamento.

Ao comparar o desempenho do modelo com outros modelos matemáticos propostos, verifica-se que o modelo apresenta um desempenho bastante satisfatório considerando todas as simulações realizadas em diferentes classes de estabilidade. O modelo proposto atingiu índices estatísticos como 0,95 para o fator de correlação (Corr) e 1 para o fator de 2 (FA2).

De forma geral, a equação proposta para a função amortecimento substituiu consistentemente a função parede do software (CFX[®]) utilizado, e simulou a variação da viscosidade turbulenta na direção perpendicular da dispersão, garantindo resultados muito próximos dos encontrados no experimento de Copenhagen.

7.1.Perspectivas para Futuros Trabalhos

O vasto campo de pesquisa na área de dispersão atmosférica permite a continuidade da pesquisa abordando novos aspectos que não foram considerados neste trabalho. Alguns tópicos abaixo, poderiam agregar valor no entendimento mais completo do fenômeno. Entre eles, o autor propõe:

- Implementar no modelo proposto a modelagem de deposição seca e úmida de poluentes;
- Modelar reações químicas de formação de poluentes secundários durante a dispersão;
- Aproximar e classificar as equações empíricas de amortecimento ao grau de convecção;
- Realizar análises de comparação com o AERMOD (rotina regulatória utilizada pela agência ambiental americana – USEP);

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AHRENS, C. D., **Essentials of Meteorology: An Invitation to the Atmosphere**, 3ª ed., New York: books/Cole Pub Co, pg. 485, 2007.

ALBANI, R. A. S., **Modelagem da Dispersão de Poluentes no ciclo Diurno da Camada Limite Atmosférica via Método de Elementos Finitos**, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Rio de Janeiro, 2014.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS (ASTM), **Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Model Performance1. D6589 – 05**, 2010.

AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS, **Recommended Guide for the Prediction of the Dispersion of Airborne Effluents**, 2ª ed., ASME, New York, 1973.

ANDRÉN, A., **A Combined First-Order Closure / Gaussian Dispersion Model**. Atmospheric Environment, v. 21, pg. 1045-1058, 1987.

ANDRÉN, A., **Application of the MIUU Meso-gg -Scale Model to the Öresund Meteorological Databank**, Report no. 87. Department of Meteorology, Uppsala University, Sweden, 1989.

ANSYS CFX[®], **Solver Modeling Guide**, 2013.

ANSYS CFX[®], **Solver Theory Guide**, 2013.

ARAGAO, L. F. S., **Solução da Equação de Difusão Atmosférica com Deposição via Transformação Integral**, Tese de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Rio de Janeiro, 2012.

ARBAGE, M. C. A., DEGRAZIA, G. A., MORAES, O. L. L., **Simulação Euleriana da Dispersão Local da Pluma de Poluente Atmosférico de Candiota – RS**, Revista Brasileira de Meteorologia, v.21, n.2, pg.153-160, 2006.

AERMOD: **Description of Model Simulation**, EPA-454/R-03-004, U. S. Environmental Protection Agency, USA, 2004.

BAKER, J., WALKER, H.L., CAI, X., **A Study of the Dispersion and Transport of Reactive Pollutants in and Above Street Canyons – A Large Eddy Simulation**, Atmospheric Environment, v. 38. pg. 6832-6892, 2004.

BALAKOV, A., **Applcation of CFD Method for Modelling in Air Pollution Problems: possibilities and Gaps**, Environmental Monitoring and Assessment, v. 65. pg. 181-189, 2000.

BOÇON, F. T., **Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica**, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC, Florianópolis, 1998.

BORTOLI, A. L., **Introdução à Dinâmica dos Fluidos Computacional**, Porto Alegre: Ed. Universidade, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRG, 2000.

BOSANQUET, C. H., PEARSON, J. L., **The Spread of Smoke and Gases from Chimneys**, Trans. Faraday Society, v. 32, pg.1249, 1936.

BOUSSINESQ, J., **Théorie de L'écoulement Tourbillant**, Mem. Pre. par. div. Sav. V. 23, Paris, 1877.

BOUBEL, R.W., FOX, D.L., TURNER, D.B. and SERN, A.C., **Fundamentals of Air Pollution**, Academic Press. Third Edition, pg. 323, 1994.

BRIGGS, G. A., **Diffusion Estimation for Small Emissions**, Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory 1973 Annual Report, USAEC Rep ATDL-106 Natl. Oceanic Admin., USA, 1974.

BROCK, F. V., HEWSON, E. W., **Analog Computing Techniques Applied to Atmospheric Diffusion - Continuous Point Source**, Journal of Applied Meteorology, v.2, n. 1, pg.129-144, 1963.

BUSKE, D., **Solução Analítica da Equação de Difusão-Advecção pelo Método GILTT Aplicada à Dispersão de Poluentes Atmosféricos**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRG, Porto Alegre, 2004.

BUSINGER, J. A., ARYA, S. P. S., **Height of the Mixed Layer in the Stably Stratified Planetary Boundary Layer**, Advances in Geophysics, v. 18A, pg. 73-92, 1974.

CARVALHO, J.C., **Um Estudo Numérico da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Convectiva**, Dissertação de mestrado, Universidade de São Paulo - USP, São Paulo, 1996.

CARVALHO, J. C., VILHENA, M. T., Solução da Equação de Langevin pelo Método iterativo de Picard. In: MOREIRA, D. M.; CARVALHO, J. C.; VILHENA, M. T., **Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRG, Porto Alegre, pg. 59-78, 2004.

CARVALHO, J. C., et al., **Lagrangian Stochastic Dispersion Modelling for the Simulation of the Release of Contaminants from Tall and Low Sources**, Meteorologische Zeitschrift, Stuttgart, v. 11, n.2, pg. 89-97, 2002.

CHANG, J. C.; HANNA, S. R., **Air Quality Model Performance Evaluation**. Meteorol Atmos Phys 87, pg.167–196, 2004.

CHU, A.K.M., KWOK, R.C.W., YU, K.N., **Study of Pollution Dispersion in Urban Areas Using Computational Fluid Dynamics (CFD) and Geographic Information System (GIS)**, Environmental Modelling and Software, v.20. pg 273-277, 2005.

CHANG, J. S., et al., **Three-Dimensional Eulerian Acid Deposition Model: Physical Concepts and Formulation**, J. of Geophysics Research, v. 92, pg. 14681-14700, 1988.

CIMORELLI, A. J., et al., **AERMOD: A Dispersion Model for Industrial Source Applications. Part I: General Model Formulation and Boundary Layer Characterization**, Journal of Applied Meteorology, v. 44, pg 682 – 693, 2005.

DAVIS, C. G., BUNKER, S. S., MUTSCHELECNER, J. P., **Atmospheric Transport Models for Complex Terrain**, Journal of Climate and Applied Meteorology, v. 23, pg. 235-238, 1984.

DAWSON, P. J., **A Numerical Model to Simulate the Atmospheric Transport and Diffusion of Pollutants over Complex Terrain**, Ph. D. Thesis. Washington State University, 1987.

DAWSON, P.J., STOCK, D.E., LAMB, B., **The Numerical Simulation of Airflow and Dispersion in Three-dimensional Atmospheric Recirculation Zones**, Journal of Applied meteorology, v.30, pg 1005-1024, 1991.

DEGRAZIA, F. C., **Derivação de Escalas de Tempo Lagrangeanas Dependentes da Distância da Fonte: Uma aplicação na Dispersão de Contaminantes na Camada Limite Planetária Estável e Neutra**, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, 2016.

DEGRAZIA, G. A., **Dispersão Lateral de Poluentes na Baixa Atmosfera**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRG, Porto Alegre, 1983.

DEGRAZIA, G. A., MORAES, L. L. O., **Simulação Numérica da Dispersão de Poluentes em Camadas Limites Planetárias Convectiva e Estável**, Revista Brasileira de Meteorologia; 1989; v. 4, pg, 11, 275-287, 1989.

DIHLMANN, A., **Simulação Numérica da Descarga Térmica de Chaminés em Ambiente Uniforme e Estratificado**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC, Florianópolis, 1992.

EDELING, W. N., CINEELLA, P., DWIGHT, R. P., BIJL, H., **Bayesian estimates of parameter variability in the $k-\epsilon$ turbulence model**, Journal of Computational Physics, v. 258, pg.73-94, 2014.

FERRERO, E., **Lagrangian Particle Models (Theory)**. In: ZANNETTI, P. (Ed.). **Air quality Modeloing: Theories, Methodologies, Computacional Techniques and Aavailable Database and Software**, [S.I]: EnviroComp Inst., v.2, Cap.11, 2003.

FACKRELL, J. E., ROBINS, A. G., **Concentration Fluctuations and Fluxes in Plumes from a Point Source in a Turbulent Boundary-Layer**. Journal of Fluid Mechanics, v. 117, pg. 1-26, 1982.

FISHER, B. E. A., SMITH, R., **Expanding Box Models for the Long-Range Transport of Chemically Reacting Airborne Material**, Atmospheric Environment, v. 21, n. 1, pg. 195-199, 1987.

GARRAT, J.R., **The Atmospheric Boundary Layer**, Cambridge Atmospheric Space Science Series, v.1, pg 1-5, 1994.

GARRET, A. J., SMITH, F. G., **Two-Dimensional Simulations of Drainage Winds and Diffusion Compared to Observations**, Journal of Climate and Applied Meteorology, v. 23, p. 597-610, 1984.

GIBSSON, M. M., LAUNDER B. E., **Ground Effects on Pressure Fluctuations in the Atmospheric Boundary Layer**, Journal of Fluid Mechanics, v. 86, n. 3, pg. 491-511, 1978.

GIFFORD, F. A., **Use of Routine Meteorological Observations for Estimating Atmospheric Dispersion**, Nuclear Safety, v.2, pg. 47-51, 1961.

GROSS, G., **An Explanation of the Maloja-Serpent by Numerical Simulation**, Beitr. Phys. Atmosph., v. 58, pg. 441, 1986.

GRYNING, S. E., LYCK, E., **Atmospheric Dispersion from Elevated Sources in an Urban Area**. J. of Climate and Applied Meteorology, v. 23, n. 4, pg. 651-660, 1984.

GRYING, S.E., LYCK, E., **The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements**, Denmark: RisØ National Laboratory, v. 1, pg. 75, 2007.

GUERRERO, J., PIMENTEL, L., OLIVEIRA-J_UNIOR, J., et al., **Analytical Solution of Steady-State Atmospheric Diffusion Equation"**, Atmospheric Environment, v. 55, pg. 201, 2012.

HANNA, S. R., BRIGSS, G. A., HOSKER, R. P., **Handbook on Atmospheric Diffusion**, U.S. Dept. of Energy report DOE/TIC-11223, Washington, DC, 1982.

HANNA, S. R., CHANG, J. C., **Development of an Urban Dispersion Model and its Evaluation Using Indianapolis Data**, Proc. of the 82nd A&WMA Annual Meeting, Anaheim, CA, USA, jun. 1989.

HICKMANN, A. J., COLWILL, D. M., **Estimation of Air Pollution Concentration**, TRRL Laboratory Report 1052, 1982.

HOINASKI, L., **Parametrização de Coeficientes de Dispersão Lateral em Modelos de Qualidade do Ar para Previsões em Tempos de Média Curtos**, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina - UFRS, Florianópolis, 2015.

HOINASKI, L., FRANCO, D., HAAS, R., MARTINS, R. F., LISBOA, H. D. M., **Investigation of Rainwater Contamination Sources in the Southern Part of Brazil.** Environmental Technology, v. 35, n. 7, p. 868-881, 2013a.

HOINASKI, L., FRANCO, D., STUETZ, R. M., SIVRET, E. C., DE MELO LISBOA, H., **Investigation of PM10 sources in Santa Catarina, Brazil through graphical interpretation analysis combined with receptor modelling.** Environmental Technology, v. 34, n. 17, pg. 2453-2463, 2013b.

HUANG, C. H., **Theory of Dispersion in Turbulent Shear Flow,** Atmospheric Environment, v.13, pg. 453-463, 1979.

IGCI, A. A., ARICI, M. E., **A Comparative Study of Four Low-Reynolds-Number k - ϵ Turbulence Models for Periodic Fully Developed Duct Flow and Heat Transfer,** Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, An International Journal of Computation and Methodology, v. 69, pg. 234-248, UK, 2016.

JOHR, H., **O Verde é Negócio,** 2^a ed., São Paulo, Editora Saraiva, 1994.

KAMS – **The Kwinana Air Modeling Study, Department of Conservation & Environment, Perth Western Austrália,** report 10, 1982.

KERR, A. A. F. S., **Caracterização Física do Aerossol Atmosférico de Cubatão e uma Experiência de Aplicação de Modelo de Dispersão por Pluma Gaussiana,** Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo - USP, São Paulo, 1983.

KOO, Y. S., **Pollutant Transport in Buoyancy Driven Atmospheric Flows,** Ph. D. Thesis. The Louisiana State University and Agricultural and Mechanical Col., 1993.

LAMB, R. G., Chen, W. H., SEINFELD, J. H., **Numeric-Empirical Analyses of Atmospheric Diffusion Theories,** Journal of Atmospheric Sciences, v. 32, pg. 1794-1807, 1975.

LANTZ, R. B., **Use of 3D Numerical Air Pollution Models in Planning Plant Location, Design and Operation,** Canadian Petroleum Technology, v. 11, n. 3, 1972.

LAUNDER, B. E, SPALDING, D. B., **Mathematical Models of Turbulence,** Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science and Technology, Academic Press, Londres, 1972.

LAUNDER, B. E, SPALDING, D. B., **The Numerical Computation of Turbulent Flows,** Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 3, pg. 269-289, 1974.

LEE, H. N., **Finite Element Numerical Study of Atmospheric Turbulent Motion and Diffusion in the Planetary Boundary Layer,** Proc. of the Int. Conf. in Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, John Wiley and Sons (Halsted Press), New York, pg.781-791, 1978.

LEE, H. N., **Three-Dimensional Analytical Models Suitable for Gaseous and Particulate Pollutant Transport, Diffusion, Transformation and Removal**, Atmospheric Environment, v. 19, n. 11, pg. 1951-1957, 1985.

LISBOA, H.M., **Controle da Poluição Atmosférica – ENS 5133**, Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, 2005.

LORERDO-SOURA, SCHETTINI, PALUCH., **Simulação da Camada Limite em Túnel de Vento**, IV Escola de Primavera de Transição e Turbulência, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul - PUCRG, Porto Alegre, 2004.

LORA E. E. S., **Prevenção e Controle da Poluição nos Setores Energético, Industrial e de Transporte**, 2ª ed., Editora Interciência, Rio de Janeiro, 2002.

MALISKA, C. R., **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**, Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 1995.

MARCHI, C. H., **Solução Numérica de escoamentos Tridimensionais Viscosos em Qualquer Regime de Velocidade**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, Florianópolis, 1992.

MATHUR, A., S. HE, **Performance and Implementation of the Launder–Sharma Low-Reynolds number turbulence model**, Computers & Fluids, Department of Mechanical Engineering, University of Sheffield, v. 79, pg. 134-139, Sheffield, UK, 2013.

MELLO, K. B., **Simulação da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária Através da Solução da Equação de Langevin pelo Método de Decomposição**, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRG, Porto Alegre, 2010.

MENESES, L. R., **Desenvolvimento de um Modelo Semi-lagrangiano para simular a dispersão de poluentes na atmosfera**, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Paraná - UFPR, Curitiba, 2015.

MONTEIRO, V. C., **Implementação de Levantamento de Pluma de Chaminé no Modelo de Dispersão de Poluentes Atmosféricos Modelar**, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Paraná - UFPR, Curitiba, 2014.

MORES & CEVEDO., **Camada Limite Planetária – Problemas com Medições e Interpretações de Dados**, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRG, Porto Alegre, 2004.

MORAES, M. R., **Implementação de um Sistema de Modelos para Qualidade do Ar**, Universidade Federal de Santa Catarina - UFRG, Florianópolis, 2001.

PANOSFSKY, H. A., DUTTON, J. A., **Atmospheric Turbulence - Models and Methods for Engineering Applications**, John Wiley & Sons, New York, 1984.

PASQUILL. F., **The Estimation of the Dispersion of Windborne Material**, Meteorological Magazine, v. 90, pg. 33-49, 1961.

PASQUILL, F., **Atmospheric Diffusion**, D. Van Nostrand Company Ltd. Princeton, New Jersey, 1962.

PATANKAR, S. V., **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

PERRY, S. G., **A Dispersion Model for Sources Near Complex Topography**, Part II, Technical Formulations. *Journal of Applied Meteorology*, v. 31, pg. 633-660, 1992.

PLATE, E. J., **Aerodynamic Characteristics of Atmospheric Boundary Layer**, U. S Atomic Energy Commission, 1971.

PFLUCK, C. E. F., **Simulação Fluidodinâmica da Dispersão de Poluentes na Atmosfera**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRG, Porto Alegre, 2010.

REEUWIJK, M. V., HADZIABDIC, M., **Modelling High Schmidt Number Turbulent Mass Transfer**, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 51, pg. 42-49, 2015.

RICHARDSON, L. F., PROCTOR, D., **Diffusion Over Distances Ranging from 3 km to 86 km**, *Memoirs of the Royal Meteorological Society*, v. 1, n. 1, 1925.

RICHARDSON, L. F., **Atmospheric Diffusion Shown on a Distance-Neighbor Graph**, *Proc. of Royal Society, A*, v. 110, pg. 709, 1926.

ROSSBY, C. G., **A Generalization of the Theory of the Mixing Length With Applications to Atmospheric and Oceanic Turbulence**, *Massachusetts Institute of Technology Meteorological papers*, v. 1, n. 4, 1932.

SANTOS, J. M., **Simulação Numérica Tridimensional da Dispersão de Poluentes na Atmosfera**, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - PUCRJ, Rio de Janeiro, 1992a.

SANTOS, J. M., NIECKELE, A. O., AZEVEDO, L. F. A., **Dispersão de Contaminantes na Atmosfera: Modelagem Através da Solução Numérica das Equações Fundamentais de Transporte**, IV Encontro Nacional de Ciências Térmicas, ABCM, Rio de Janeiro, p. 419-422, 1992b.

SANTOS, J. M., NIECKELE, A. O., AZEVEDO, L. F. A., **Efeitos da Velocidade Terminal na Dispersão de Partículas na Atmosfera**, XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Brasília, p. 1069-1071, 1993.

SEINFELD, J. H., **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**, John Wiley & Sons. New York, USA, 1986.

SHARAN, M. AND KUMAR, P., **Analytical Model for Dispersion of Pollutants from a Continuous Source in the Atmospheric Boundary Layer"**, *Proc. R.Soc. A*, v. 466, pg. 383-406, 2010.

- STERN, A. C., **Air Pollution**, vol. 1, 2^a ed., Academic Press, 1968.
- STULL, R. B., **Integral Scales for the Nocturnal Boundary Layer. Part 1: Empirical Depth Relationships**, Journal of Climate and Applied Meteorology, v. 22, n. 4, pg. 673-686, 1983.
- STULL, R. B., **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**, Kluwer Academic Publishers. 1986.
- SUTTON, O. G., **A Theory of Eddy Diffusion in the Atmosphere**, Proc. of Royal Society, A, v.135, pg. 143, 1932.
- SUTTON, O. G., **The Theoretical Distribution of Airborne Pollution from Factory Chimneys**, Quart. J. Royal Meteorological Society, v. 73, pg. 426, 1947.
- TAYLOR, G. I., **Diffusion by Continuous Movements**, Proc. London Math. Soc., v. 20, n. 196, 1921.
- TIRABASSI, T., TAGLIAZUCC, M., ZANNETTI, P. KAPPA-G, **a Non-Gaussian Plume Dispersion Model: Description and Evaluation Against Tracer Measurements**, Journal of the Air Pollution Control Association, v. 36, n. 5, pg. 592-596, 1986.
- TIRABASSI, T., **Analytical Air Pollution Advection and Diffusion Models. Water, Air, and Soil Pollution**, v. 47, pg. 19-24, 1989.
- VASCONCELLOS, J. F. V., MALISKA, C. R., **Numerical Study of the Turbulent Flow in a Bifurcating Channel Using a Multidomain Procedure**, Anais do V Encontro Nacional de Ciências Térmicas, ABCM, pg. 109-112, São Paulo - SP, 1994.
- VICENTINI, P. C., **Uso de Modelos de Qualidade do Ar para a Avaliação do Efeito do PROCONVE entre 2008 e 2020 na Região Metropolitana do Rio de Janeiro**, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Rio de Janeiro, 2011.
- WILLMOTT, C., MATSUURA, K., **Advantages of the Mean Absolute Error (MAE) over the Root Mean Square Error (RMSE) in Assessing Average Model Performance**, Clim. Res., v. 30, 79–82, 2005.
- WRAY, T. J., AGARWAL, R. K., **Low-Reynolds-Number One-Equation Turbulence Model Based on $k-\omega$ Closure**, AIAA Journal, v. 53, pg. 2216-2227, USA, 2015.
- ZANNETTI, P., **Air Pollution Modelling**, Southampton: Computational Mechanics, Publ., 1990.
- ZHANG, Y., BAI, J., XU, J., HAN, X., WANG, P., **An Improved Low-Reynolds-Number $k - \epsilon$ Model for Aerodynamic Flows**, International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation, v. 17, pg. 99-112, 2016.